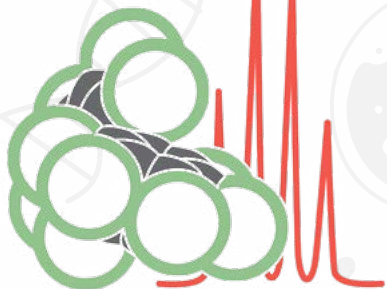


Memoria 2016 - 2018

**(IQOG)**  
**INSTITUTO**  
**DE QUÍMICA**  
**ORGÁNICA**  
**GENERAL**



iqog-csic



## **Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC)**

**Sede:** C/ Juan de la Cierva 3. 28006 Madrid

**Diseño y maquetación:** Daniel Gómez Torrico (IQOG - CSIC)

**Fotografías:** Personal del IQOG y de la Unidad de Cultura Científica del Centro de Química Orgánica Lora Tamayo (CENQUIOR-CSIC)

**Correo electrónico:** [info@iqog.csic.es](mailto:info@iqog.csic.es)

# Índice de contenidos

<b>1. Presentación</b>	5		
<b>2. Organización</b>	9		
- Estructura	11		
- Recursos humanos	12		
- Recursos económicos	14		
<b>3. Actividad científica</b>	17		
- Departamento de Análisis Instrumental y Química Ambiental ( <b>AIQA</b> )	19		
- Grupo de Análisis instrumental en Medio Ambiente, Alimentos y Salud ( <b>AIMAS</b> )	19		
- Departamento de Química Bio-Orgánica ( <b>QBO</b> )	32		
- Grupo de Oligosacáridos y Glicosistemas	32		
- Grupo de Glicoquímica Biológica	36		
- Grupo de Glicomiméticos y Nanomateriales	42		
- Grupo de Glicoquímica y Reconocimiento Molecular	44		
- Grupo de Sistemas Insaturados	46		
- Departamento de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos ( <b>SEPCO</b> )	53		
- Grupo de Péptidos y Compuestos Aromáticos ( <b>PEPARO</b> )	53		
- Grupo de Síntesis Asimétrica con Sulfóxidos	59		
- Grupo de Reconocimiento Molecular: Interacción Carbohidrato-ADN	62		
		· Grupo de Investigación del Dr. Pedro Noheda	64
		· Laboratorio de Química Médica	69
		· Grupo de Química Farmacéutica de los Compuestos de Azufre y Selenio	76
		· Grupo de Química Bio - Organometálica	78
		<b>4. Unidades de apoyo</b>	83
		- Servicios Científico - Técnicos	85
		- Catálogo de Prestaciones del CSIC	85
		- Servicio de Espectrometría de Masas	85
		- Unidad de Apoyo a la Investigación	87
		- Otras Actividades	91
		- Servicio de Informática	91
		<b>5. Comunicación y Difusión de la Ciencia</b>	93
		- Ciclo de Conferencias del IQOG	95
		- Desayunos Científicos del IQOG	101
		- Semana de la Ciencia	102
		- Programa 4º ESO + Empresa	104
		- Curso de Divulgación "Los avances de la química y su impacto en la sociedad"	105
		- Otras Actividades de Divulgación	105
		<b>6. Anexo. Publicaciones</b>	107
		- Producción Científica	109
		- Listado de Publicaciones	110







# 1. PRESENTACIÓN





El Instituto de Química Orgánica General (IQOG) pertenece al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), agencia estatal cuyo objetivo es promover la investigación científica y el desarrollo tecnológico. En el IQOG se realiza investigación básica y orientada en distintos aspectos de la química que con frecuencia interacciona con otros campos como biología, medicina, medioambiente, tecnología de alimentos y materiales. Esta característica del Instituto facilita la colaboración con otros grupos tanto de instituciones públicas como con empresas.

Actualmente nuestras líneas de investigación se enmarcan en diferentes temáticas que incluyen el desarrollo de herramientas de síntesis, catalizadores y nuevos materiales; el diseño y síntesis de moléculas con aplicaciones potenciales en el área de la salud; estudios de reconocimiento molecular; y el desarrollo de metodologías analíticas innovadoras con aplicaciones en salud, alimentos y medioambiente.

A lo largo de su historia, el Instituto ha venido dando muestras de su capacidad para desarrollar investigación de calidad avalada por el número de los artículos publicados en revistas científicas de alto índice de impacto y la captación de contratos y convenios con empresas, y por su capacidad de generar patentes y licenciarlas. Pese a la situación complicada y los recortes sufridos estos años en el sistema de I+D español, durante el trienio 2016-2018, el IQOG ha mantenido la calidad de su actividad científica, con trabajos publicados mayoritariamente en revistas de impacto situado en el primer cuartil. Ello es fruto del esfuerzo y profesionalidad de todo personal que integra el Instituto.

Durante estos años se mantuvo una buena actividad en la celebración de seminarios y conferencias a cargo de conferenciantes invitados pertenecientes a otros centros de investigación nacionales y extranjeros y también de personal del Instituto.

Como viene siendo habitual, el Instituto participa muy activamente en labores divulgativas como en la Semana de la Ciencia, en la que además de las visitas guiadas a laboratorios, organizamos los talleres “¿Quieres venir a preparar la aspirina?” y “Contaminantes tóxicos y persistentes. ¡Aprende a buscarlos e identificarlos!” Asimismo, participamos en el programa de la Comunidad de Madrid “4º de la ESO+empresa”, siendo uno de los Institutos del CSIC que más estudiantes acoge. Cabe destacar también el curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”, que viene celebrándose ininterrumpidamente desde el año 2009.

La memoria que se presenta resume la actividad llevada a cabo por el IQOG durante el trienio 2016-2018, agrupada por los Departamentos de Investigación configurados en el Instituto: Análisis Instrumental y Química Ambiental (AIQA), Química Bio-Orgánica (QBO) y Síntesis, Estructura y Propiedades de los Compuestos Orgánicos (SEPCO). Los indicadores de nuestra actividad y los integrantes de los equipos de investigación se presentan a continuación.

Por último, quiero agradecer a Daniel Gómez Torrico el trabajo realizado por la maquetación de esta memoria.

**Alfonso Fernández-Mayoralas**  
Madrid, abril de 2020

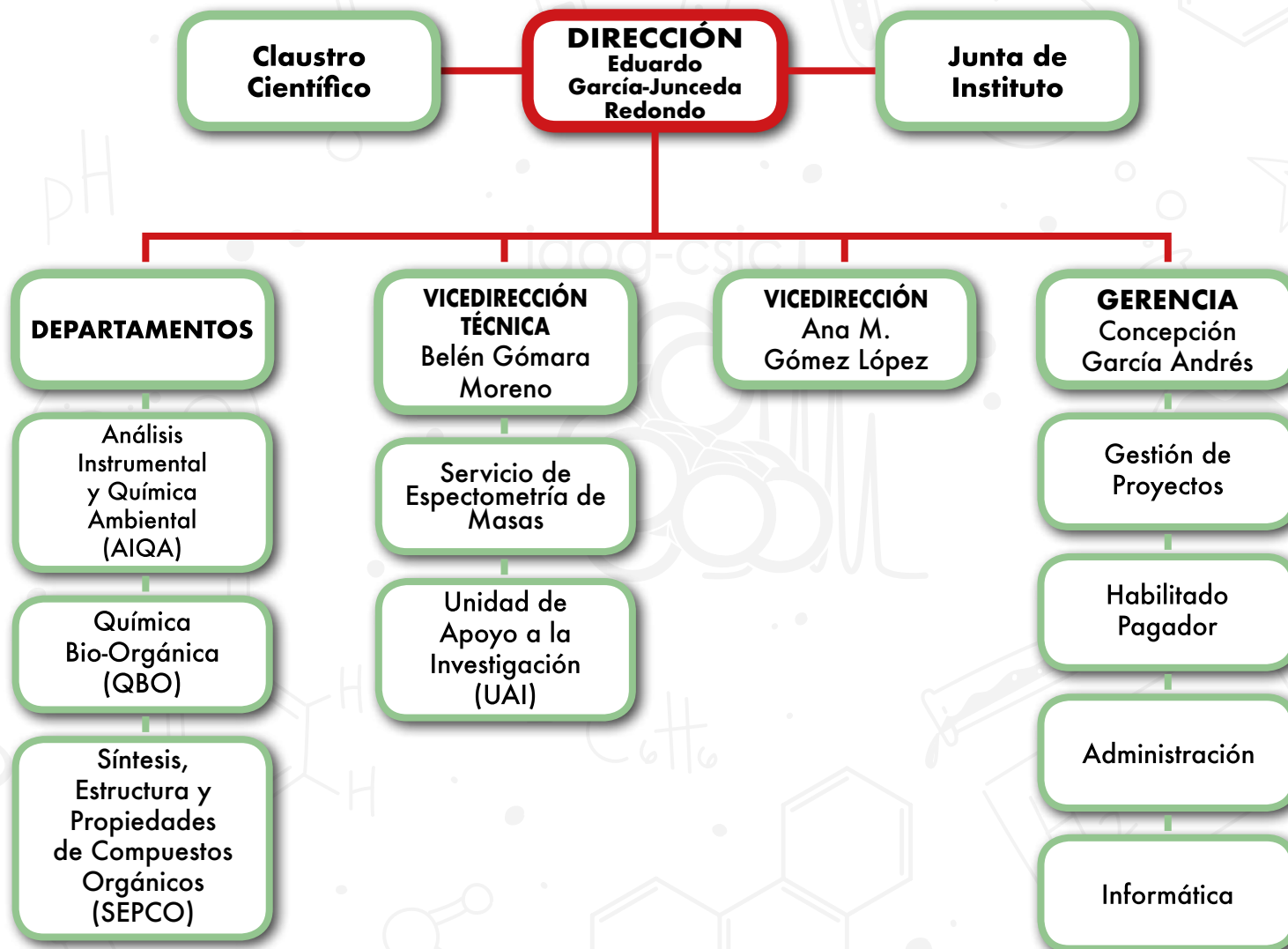




A close-up photograph of a person's hand holding a stack of white papers. A black binder clip is visible on the right side of the stack. In the foreground, another stack of papers is visible, secured with a red binder clip. The background is softly blurred, showing a white surface and a person's arm in a white shirt.

## **2. ORGANIZACIÓN**

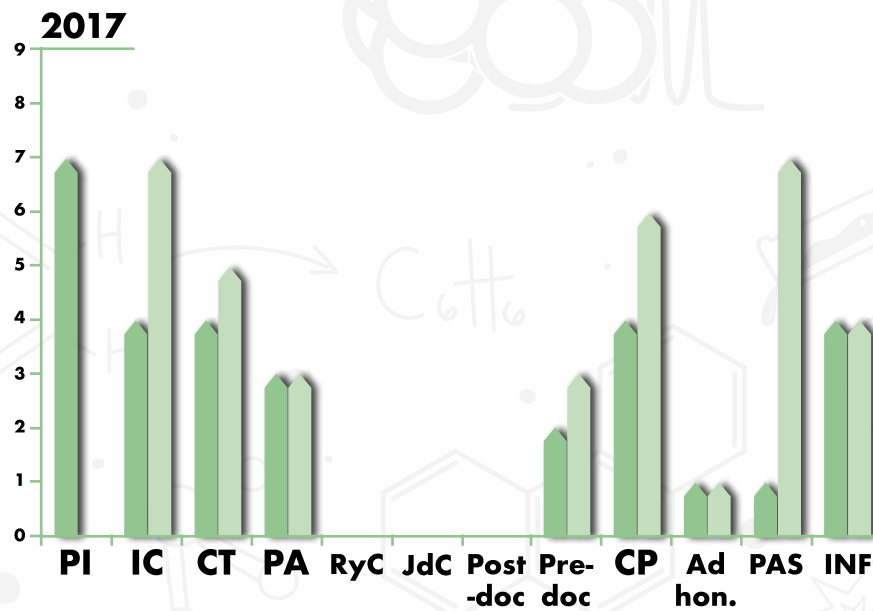
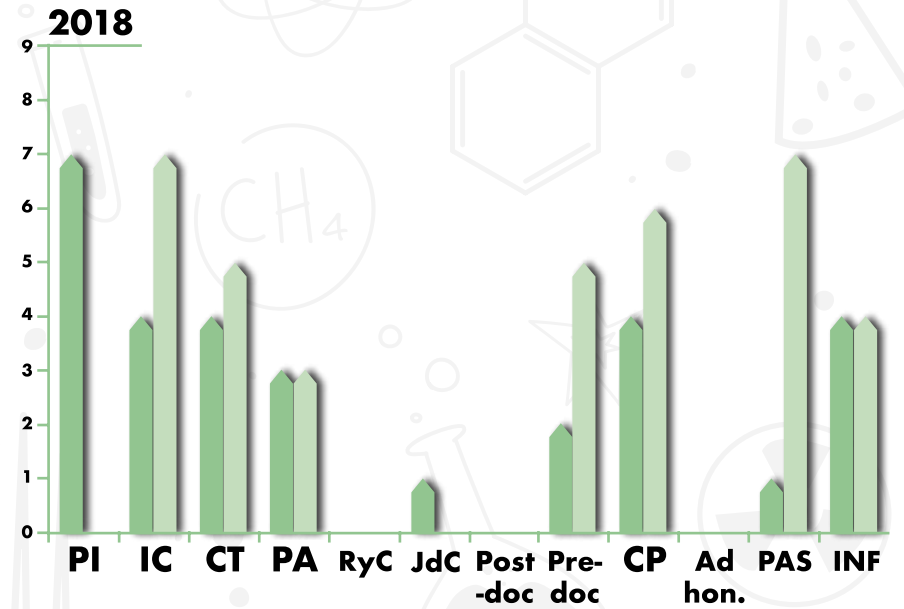
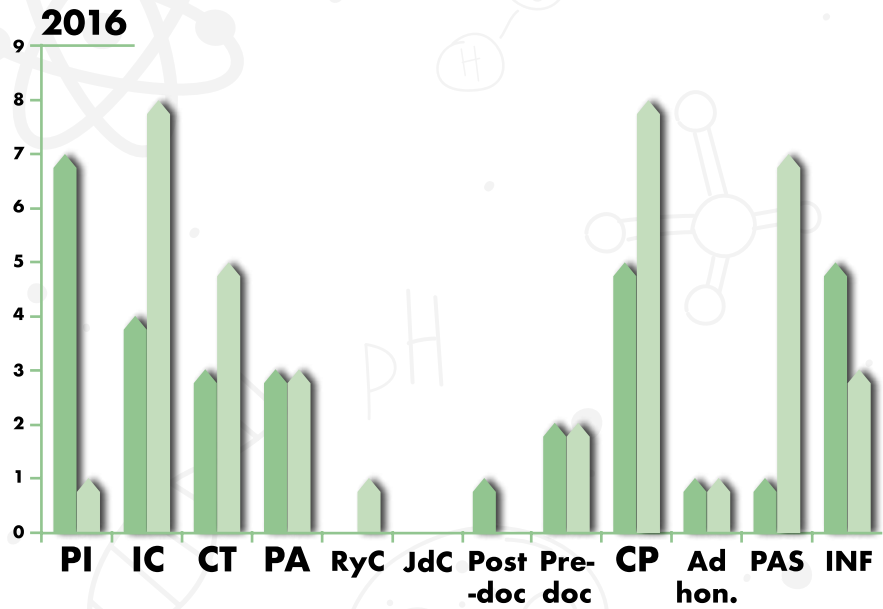




# Recursos Humanos

PERSONAL	2016		2017		2018	
	Hombres	Mujeres	Hombres	Mujeres	Hombres	Mujeres
Profesores de Investigación (PI)	7	1	7	—	7	—
Investigadores Científicos (IC)	4	8	4	7	4	7
Científicos Titulares (CT)	3	5	4	5	4	5
Personal de Apoyo (PA)	3	3	3	3	3	3
Contratos Ramón y Cajal (RyC)	—	1	—	—	—	—
Contratos Postdoct Juan de la Cierva (JdC)	—	—	—	—	1	—
Contratos Post-doctorales (MINECO) (Post-doc)	1	—	—	—	—	—
Contratos Pre-doctorales (FPI/MINECO) (Pre-doc)	2	2	2	3	2	5
Contratados Proyectos (obra o serv.) (CP)	5	8	4	6	4	6
Doctor Vinculado <i>Ad honorem</i> (Ad hon.)	1	1	1	1	—	—
Personal Administración y Servicios (PAS)	1	7	1	7	1	7
Personal Laboral Indefinido (INF)	5	3	4	4	4	4
<b>Total</b>	<b>32</b>	<b>39</b>	<b>30</b>	<b>36</b>	<b>30</b>	<b>37</b>

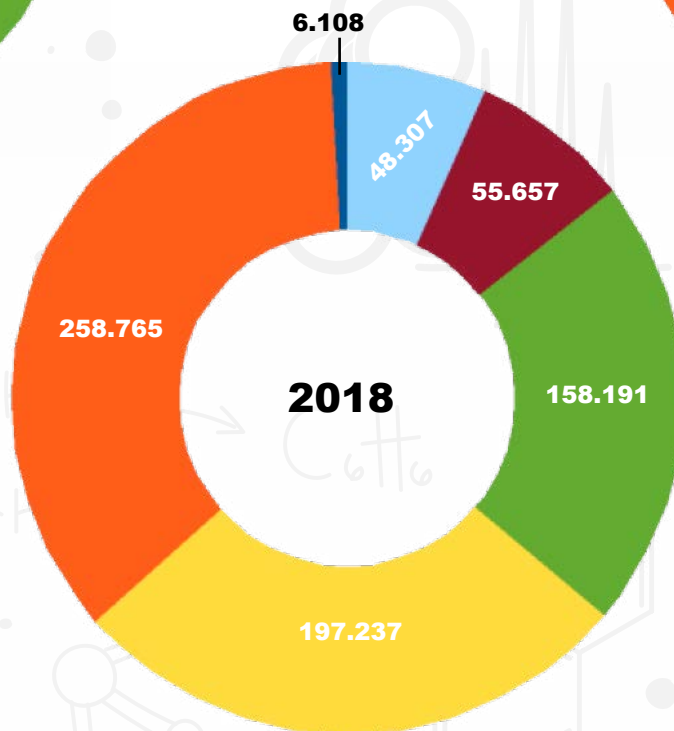
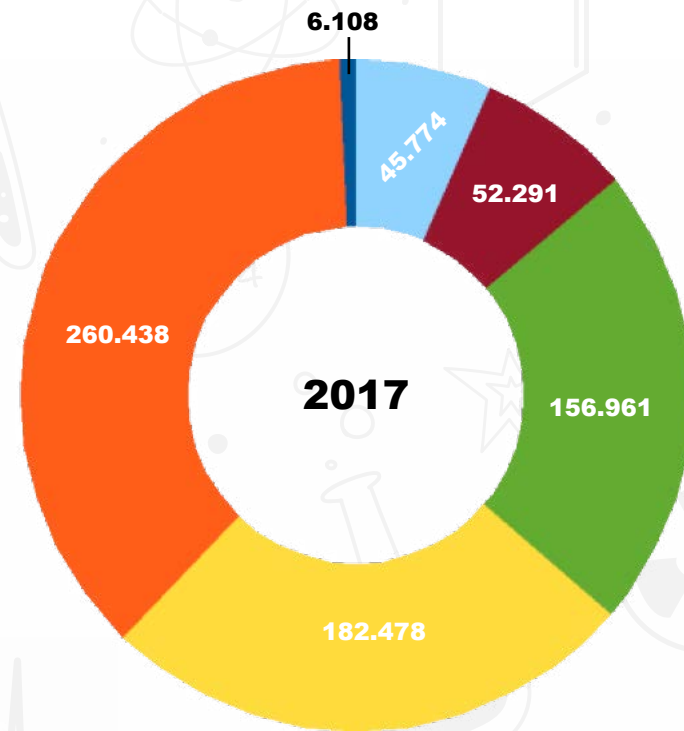
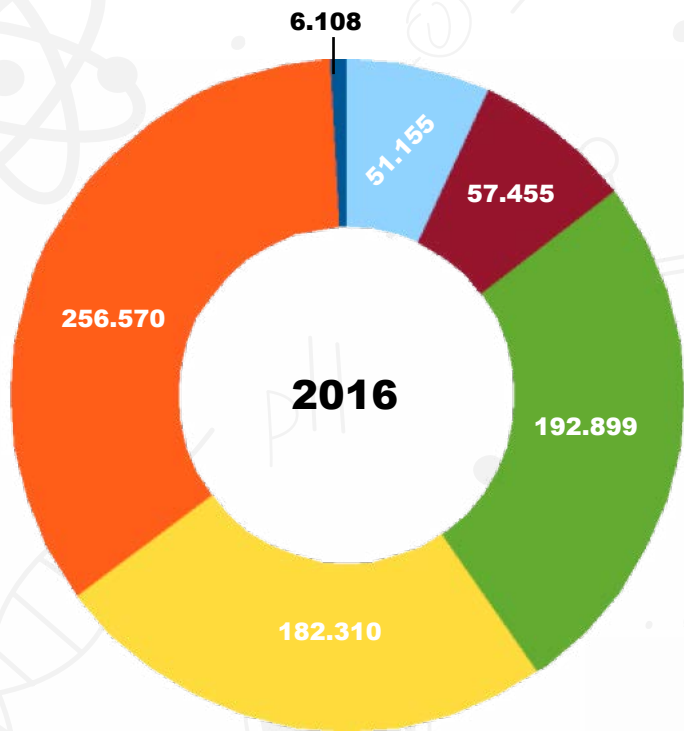




■ Hombres  
■ Mujeres

# Recursos Económicos

<b>CONCEPTO</b>	<b>2016</b>	<b>2017</b>	<b>2018</b>
Presupuesto ordinario	<b>6.108</b>	<b>6.108</b>	<b>6.108</b>
Proyectos	<b>256.570</b>	<b>260.438</b>	<b>258.765</b>
Contratos y convenios	<b>182.310</b>	<b>182.478</b>	<b>197.237</b>
Contratos de personal	<b>192.899</b>	<b>156.961</b>	<b>158.191</b>
Costes indirectos IQOG	<b>57.455</b>	<b>52.291</b>	<b>55.657</b>
Costes indirectos CENQUIOR	<b>51.155</b>	<b>45.774</b>	<b>48.307</b>
<b>TOTAL</b>	<b>746.501</b>	<b>704.053</b>	<b>724.268</b>



- Presupuesto ordinario ■
- Proyectos ■
- Contratos y convenios ■
- Contratos de personal ■
- Costes indirectos IQOG ■
- Costes indirectos CENQUIOR ■





A close-up photograph of a scientist in a laboratory. The scientist is wearing a white lab coat, a blue hairnet, and safety glasses. They are looking through the eyepiece of a white and black microscope. The background is a blurred laboratory with various glassware and equipment. A green banner with white text is overlaid on the right side of the image.

### **3. ACTIVIDAD CIENTÍFICA**





## Personal

### Personal investigador

**José Carlos Díez Masa**

**Mario Antonio Fernández Martín**

**Mercedes de Frutos Gómez**

**Belén Gómara Moreno**

**María José González Carlos**

**Begoña Jiménez Luque**

Isabel Martínez Castro

**Lourdes Ramos Rivero**

**María Luz Sanz Murias**

Jesús Sanz Perucha

### Personal de apoyo

Laura Herrero Collantes

Ángel de la Puerta García-Barroso

Ana Isabel Ruiz Matute

Ana Cristina Soria Monzón

María del Carmen Tabera Galván

## Departamento de Análisis Instrumental y Química Ambiental (AIQA)

### Grupo de Análisis Instrumental en Medio Ambiente, Alimentos y Salud (AIMAS)

### Postdoctorales

Elena M<sup>a</sup> Hurtado Fernández

Juan Muñoz Aranz

Sonia Rodríguez Sánchez

José Luis Roscales García

Jorge Sáiz Galindo

Ana Isabel Sánchez Blanco

### Personal en formación

Marta Acebrón García

Alice Bartalini

Cipriano Carrero Carralero

Diego Cabo Palacios

Juan Escobar Aranz

María Jesús García Sarrió

Samuel Garrido Vidales

Belén González Gaya

Drashti Mantsukhani Chetwani

Andrea Martín Ortiz

Adal Mena García

Diana Navarro Calderón

Estela Nogales Valenciano

Sergio Rivas Blas

María Ros Rodríguez

Belén Ruiz Suárez de Puga

Raquel Sáez Brox

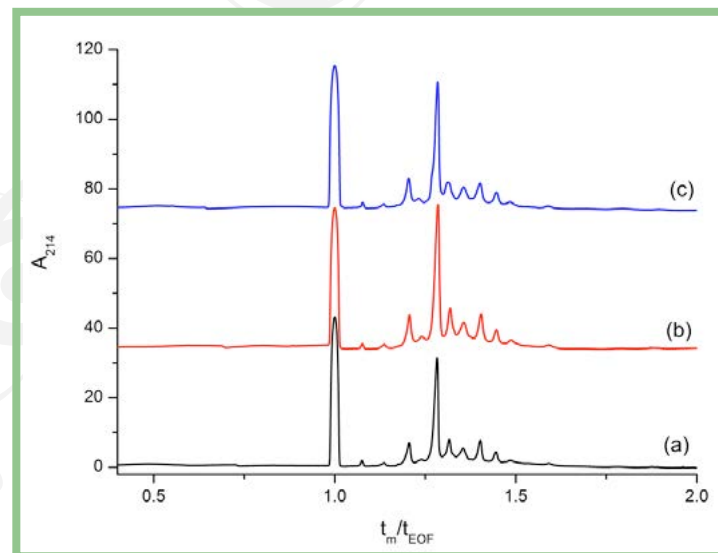
Alba Vicente Guillén

En el grupo **AIMAS** desarrollamos técnicas y metodologías analíticas innovadoras, fundamentalmente de separación (cromatografía de gases y líquidos de alta resolución y electroforesis capilar), para su aplicación en estudios dentro de los campos medioambiental, alimentario y de salud. En concreto nos centramos en:

- La extracción y el análisis de compuestos bioactivos y volátiles en alimentos, plantas y suelos.
- La cromatografía de líquidos, la electroforesis en capilares y en micro-chips y el inmuno-reconocimiento para el estudio de proteínas de interés farmacéutico y clínico.
- La determinación de contaminantes orgánicos persistentes, bioacumulables y tóxicos y el estudio de su comportamiento en el medio ambiente, los alimentos y el hombre.

## HITOS DESTACADOS

**La optimización del acondicionamiento del capilar y de la composición del tampón de separación mejoran el análisis por electroforesis capilar de isoformas del antígeno específico de próstata (PSA).** La relevancia de este estudio se debe a la



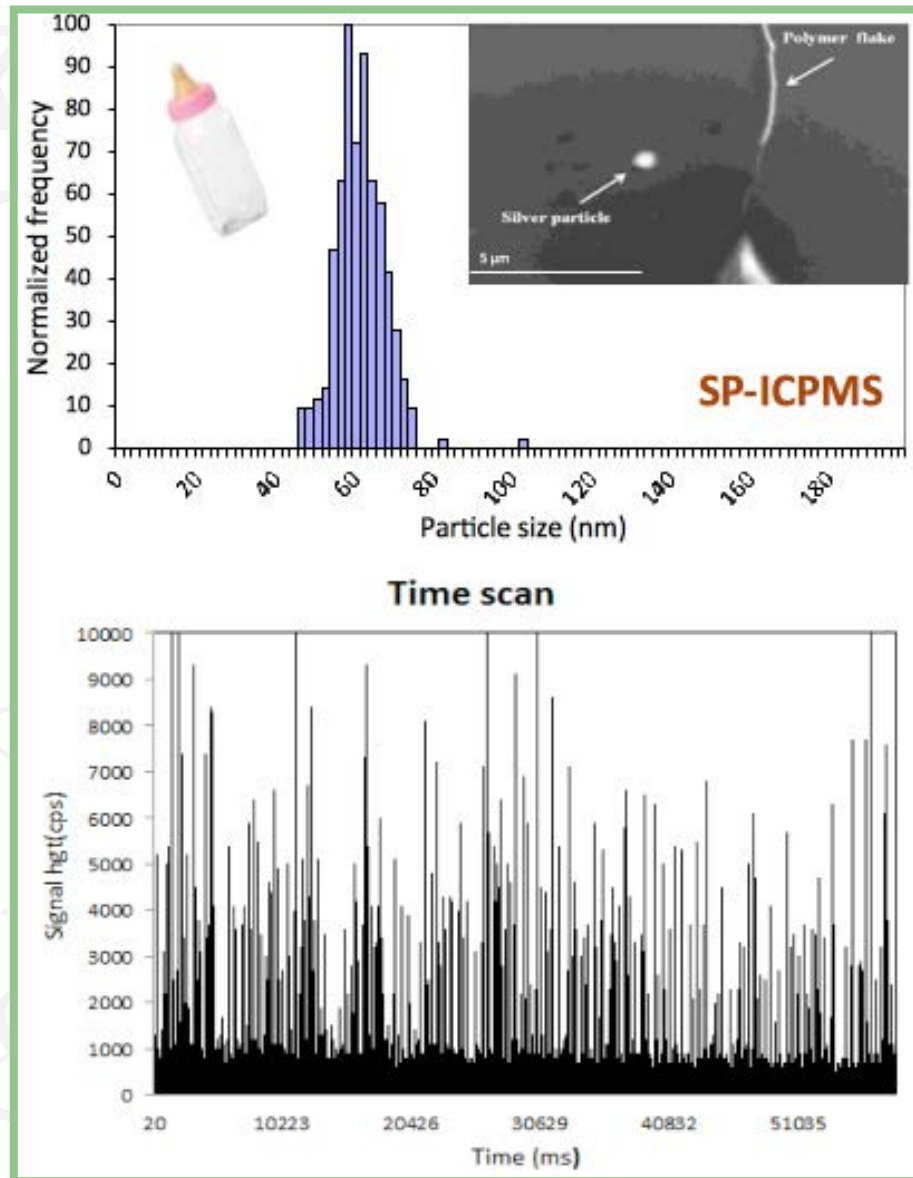
necesidad de encontrar nuevos marcadores de cáncer de próstata con elevada selectividad.

Un enfoque para lograr este fin es explorar las modificaciones en glicosilación del antígeno específico de próstata (PSA) monitorizadas por electroforesis capilar (CE). Para ello es necesario que el método de CE proporcione la separación de forma altamente reproducible de un alto número de picos de PSA, los cuales se deben principalmente a diferencias en glicosilación. En este estudio, el desarrollo de dos estrategias complementarias basadas en el tratamiento del capilar con HCl y en la optimización del tampón de separación a pH 8,0 con la inclusión de urea 3M, ha permitido lograr elevada repetibilidad y alta resolución de hasta 10 isoformas del PSA por CE.

**Desarrollo de nuevas metodologías para la especiación y caracterización de nanopartículas de plata (Ag-NPs).** La

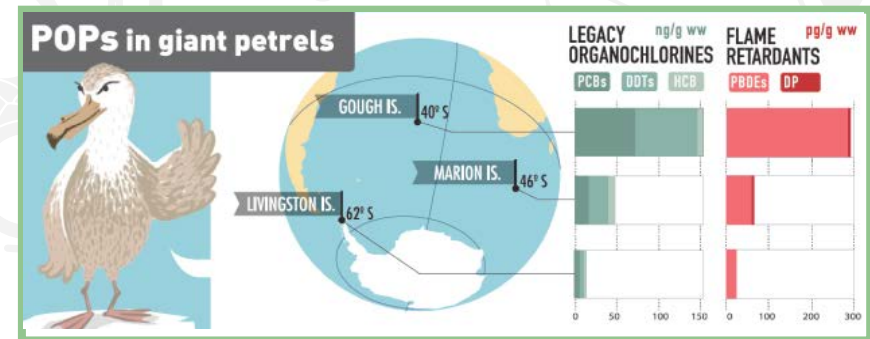
especiación de las diferentes formas en las que la plata puede estar presente en materiales y alimentos que contienen Ag-NPs es una tarea compleja por las diferentes transformaciones que éstas pueden sufrir durante el tratamiento y análisis de los extractos. Sin embargo, es un aspecto fundamental debido a la diferente actividad biológica y toxicidad de esas diferentes formas químicas de la Ag. A lo largo de estos años, en colaboración con la Profesora Dra. Milagros Gómez-Gómez, del Dpt. de Química Analítica de la Fac. de Químicas de la UCM, se han desarrollado diferentes metodologías analíticas de preparación de muestra que han permitido la extracción cuantitativa e inalterada de Ag-NPs de matrices complejas, como bolsas de plástico, biberones, y distintos complementos alimenticios. La diferenciación inequívoca de Ag-NPs de otras especies de Ag presentes en las disoluciones obtenidas y su cuantificación fue posible mediante la cuidadosa optimización de las condiciones de análisis mediante AF4-ICP-MS o mediante análisis directo con sp-ICP-MS. Estas metodologías también se emplearon para la evaluación de las posibles transformaciones químicas y determinación del destino final de las Ag-NPs durante el proceso de digestión humana.





**Exposición a DDT, HCB, PCB, PBDE y DP en petreles gigantes a través del Océano Austral.** En este estudio, se presenta la exposición diferencial a los COP en especies carroñeras del Océano

Austral, los petreles gigantes, a través de un amplio gradiente latitudinal. Se analizó una selección de COP (PCBs, HCB, DDTs, PBDEs) y compuestos relacionados, como el Declorano Plus (DP) en plasma de petreles gigantes del sur (*Macronectes giganteus*) que se reproducen en Livingston (62°S 61°W, Antártida), Marion (46°S 37°E, Islas subantárticas) y Gough (40°S 10°W, templado frío). También se estudiaron los petreles gigantes del norte (*M. halli*) de la Isla Marion. Se emplearon relaciones de isótopos estables de C y N ( $\delta^{13}\text{C}$  y  $\delta^{15}\text{N}$ ) como trazadores de dieta del hábitat marino y el nivel trófico, respectivamente. La localidad de cría fue un factor importante que explica la exposición del petrel a los COP estudiados. Las relaciones significativas entre los valores de  $\delta^{13}\text{C}$  y las cargas de COP, tanto a nivel interpoblacional como intrapoblacional, respaldan las variaciones latitudinales en las zonas de alimentación como un factor clave para explicar las cargas de contaminación por COP en los petreles.

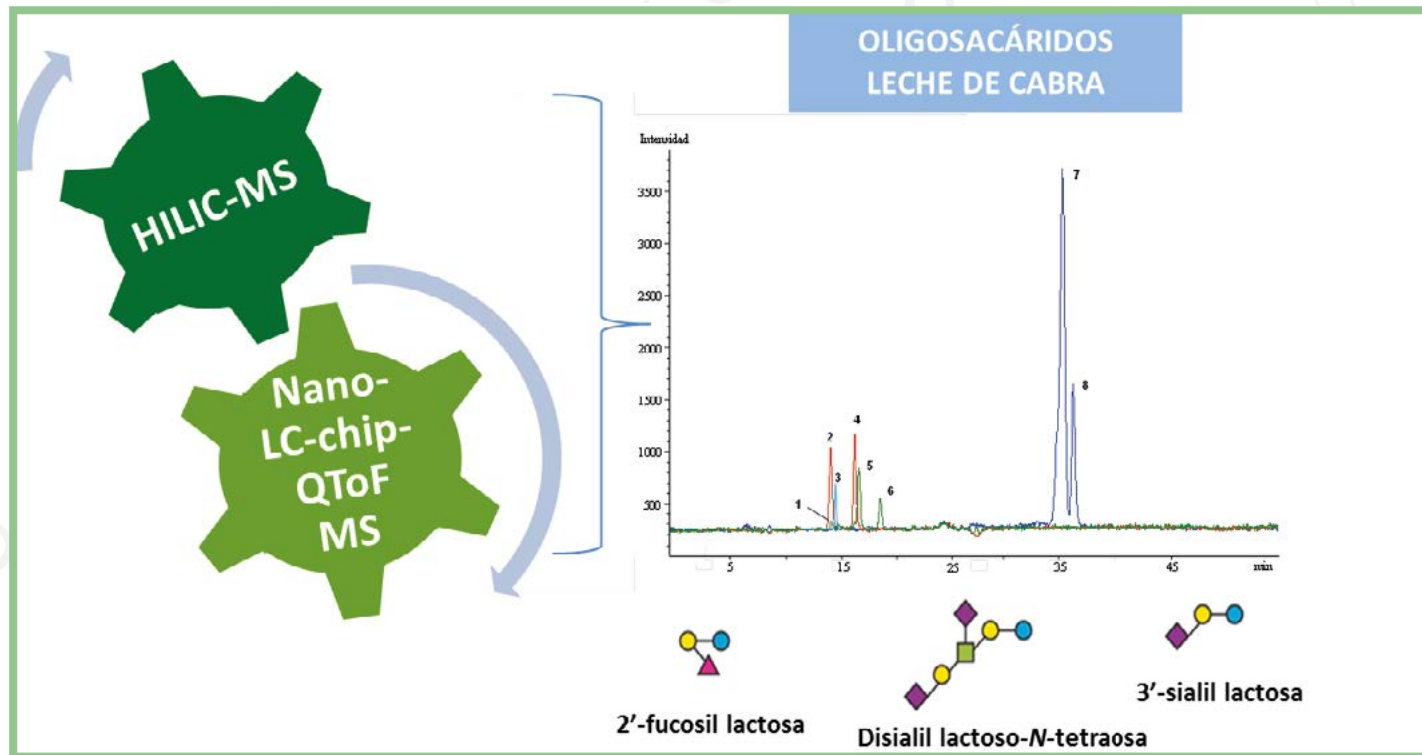


En general, los niveles de contaminantes en los petreles gigantes disminuyeron significativamente con la latitud, pero la abundancia relativa (%) de los COP más volátiles aumentó hacia la Antártida. El DP se encontró en niveles insignificantes en comparación con los COP clásicos en la fauna antártica. Los patrones espaciales de COP encontrados en petreles gigantes coinciden con los previstos por los modelos de distribución global y refuerzan la hipótesis del transporte a larga distancia como la principal fuente de COP en la Antártida. Los resultados confirman que los movimientos de la fauna silvestre fuera de la región polar aumentan notablemente la exposición a los COP.

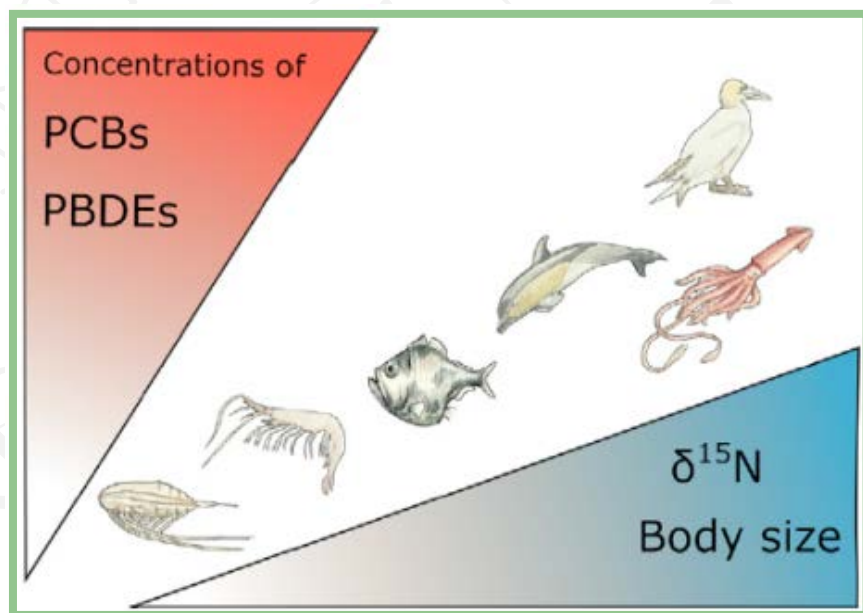
Por lo tanto, las estrategias para la conservación de las especies antárticas deberían considerar la heterogeneidad espacial en la exposición a la contaminación marina. De particular relevancia es la necesidad de una investigación más profunda sobre la exposición de los depredadores antárticos a contaminantes emergentes aún no regulados a nivel mundial.

**Evaluación de los cambios en el contenido de oligosacáridos de la leche de cabra durante el periodo de lactación mediante técnicas cromatográficas avanzadas acopladas a espectrometría de masas.** En este trabajo, llevado a cabo mediante

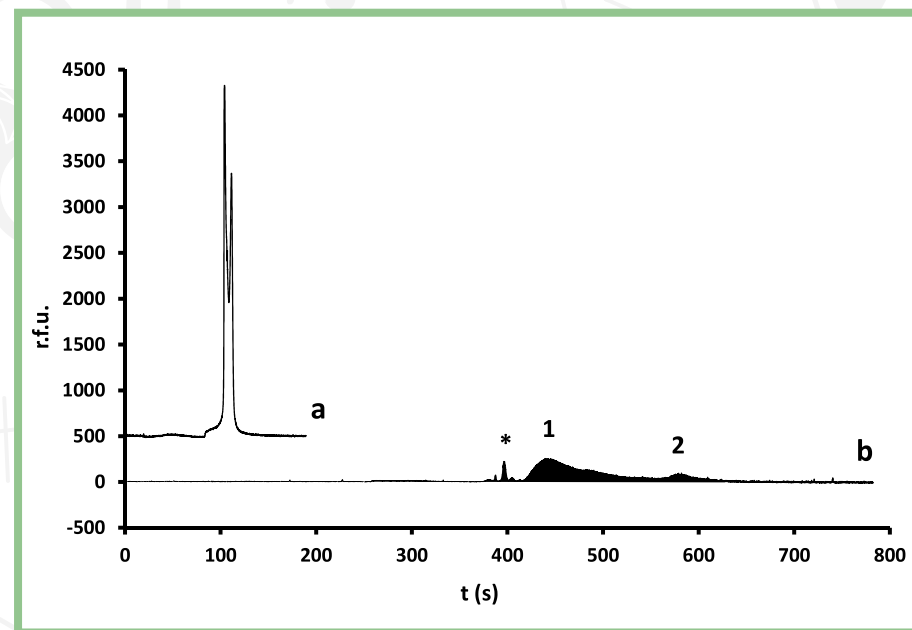
la colaboración de investigadores del IQOG, CIAL, EEZ y la Universidad de Davis, se ha conseguido estudiar la evolución del contenido de los oligosacáridos de la leche de cabra durante las distintas etapas de lactación. Para ello se han desarrollado nuevos métodos mediante HILIC-QMS y nano-LC-Chip -QTOF MS. En general, los oligosacáridos más abundantes disminuyeron durante el periodo de lactación, mientras que se observaron distintas tendencias para los oligosacáridos minoritarios. Esta es la primera vez que se lleva a cabo un estudio tan detallado de los oligosacáridos en este tipo de muestras.



**Biomagnificación de contaminantes orgánicos persistentes en el océano profundo.** Se ha estudiado la correlación de las concentraciones de bifenilos policlorados (PCBs) y polibromodifenil éteres (PBDEs) con el tamaño corporal y el nivel trófico de especies marinas del Cañón de Avilés. Los resultados revelaron que existe un incremento de los niveles de estos contaminantes según aumenta el nivel trófico de los organismos estudiados, calculado a partir de los valores de isótopos estables de nitrógeno ( $\delta^{15}\text{N}$ ). Por otro lado, se comprobó que, como el tamaño corporal de los especímenes está significativamente correlacionado con los valores de  $\delta^{15}\text{N}$ , éste puede ser usado para estimar los factores de magnificación trófica (TMF) de forma más sencilla cuando no hay disponibles medidas de  $\delta^{15}\text{N}$ .



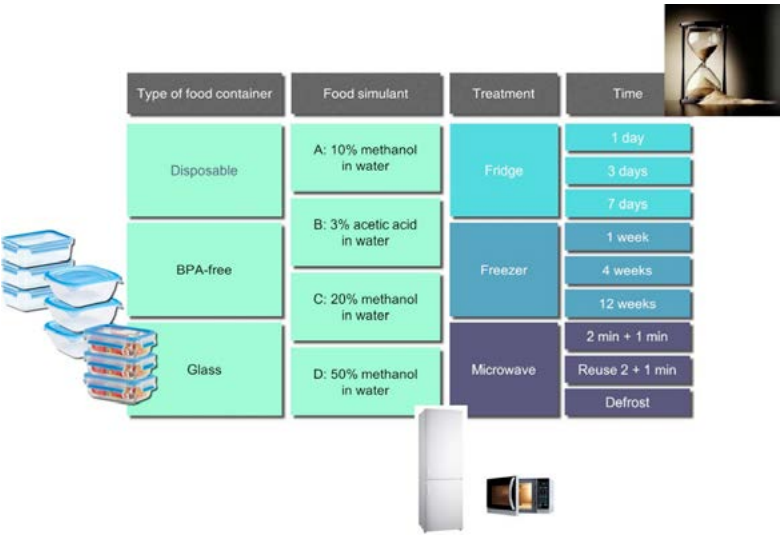
**“On-chip” isotacoforesis de transición con electroforesis en zona libre en un único canal para la preconcentración y separación de  $\alpha$ -lactoalbumina y  $\beta$ -lactoglobulina.** Este trabajo demuestra las posibilidades del uso de microchips de vidrio para la separación de proteínas en unos pocos minutos y con elevada sensibilidad de detección. Empleando  $\alpha$ -lactoalbúmina y  $\beta$ -lactoglobulina marcadas fluorescentemente como muestra, se lleva a cabo en el mismo canal del chip y de forma consecutiva 1) la preconcentración de las proteínas por isotacoforesis, 2) la separación de éstas por electroforesis en zona libre y 3) su detección por fluorescencia inducida por láser. Con el método optimizado en este estudio se consigue una separación de las dos proteínas en menos de 4 minutos, con una resolución de 1,5, y una preconcentración de la muestra de 10 veces superior a la de la muestra original gracias al uso de isotacoforesis.



### Nuevo método para la extracción asistida por microondas de terpenoides bioactivos a partir de hojas de *Mentha rotundifolia*.

En este estudio, realizado en colaboración con el ICA, se desarrolló un método de extracción asistida por microondas (MAE) para la obtención de extractos enriquecidos en terpenoides bioactivos a partir de hojas de *Mentha rotundifolia*. Dicho método presentó ventajas en cuanto a rendimientos de extracción, rapidez y reproducibilidad frente a la extracción convencional sólido-líquido y a la extracción asistida por ultrasonidos. Asimismo, se llevó a cabo una caracterización exhaustiva de los compuestos presentes en dichos extractos mediante GC-MS, identificándose un total de 46 compuestos y detectándose por primera vez varios isómeros del neofitadieno.

**Migración de disruptores endocrinos desde envases de uso doméstico.** Se ha evaluado la migración de plastificantes y otros compuestos de la industria del plástico desde las tarteras de uso doméstico al contenido de dichas tarteras, usando para ello simulantes alimentarios. Para hacer una estimación más realista, los estudios se han diseñado de tal manera que se intenta reproducir

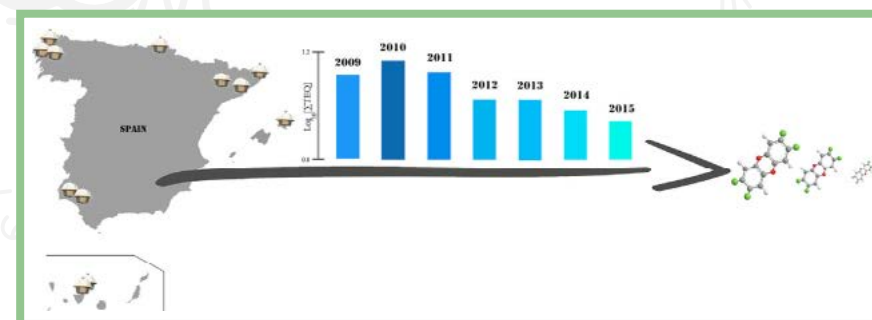


Type of food container	Food simulant	Treatment	Time
Disposable	A: 10% methanol in water	Fridge	1 day
			3 days
			7 days
BPA-free	B: 3% acetic acid in water	Freezer	1 week
			4 weeks
			12 weeks
Glass	C: 20% methanol in water	Microwave	2 min + 1 min
			Reuse 2 + 1 min
			Defrost

lo más fielmente posible las condiciones de uso en cualquier hogar (almacenamiento en frigorífico y congelador, y calentamiento/cocinado en microondas). Todas las concentraciones encontradas fueron bajas, por debajo de 4 ng/mL de simulante, valor muy inferior a los establecidos en el Reglamento (UE) No 10/2011 de la Comisión del 14 de enero de 2011 sobre materiales y objetos plásticos destinados a entrar en contacto con alimentos.

### Evaluación de la presencia de COP en el aire de España. Parte II: Observaciones espaciales y temporales (2008 – 2015).

En este trabajo se han analizado series temporales de PCDD/Fs y dl-PCBs en muestras de aire procedentes de zonas urbanas y remotas establecidas dentro de la Red Nacional de Vigilancia Ambiental de Contaminantes Orgánicos Persistentes (COP). De manera general, las mayores concentraciones se encontraron en zonas urbanas. Se han encontrado descensos significativos desde el año 2009 para las concentraciones de PCDD/Fs y no-PCBs. Para todas las familias de COP estudiados, se detectaron tendencias estacionales claras, mostrando las PCDD/Fs los mayores niveles en estaciones frías, asociado a la mayor influencia de sus fuentes de origen, como los sistemas de calefacción o quemas a cielo abierto. Por el contrario, los factores ambientales dependientes de la temperatura son los que



controlan las variaciones estacionales de los dl-PCBs. Los mayores niveles de PCDD/Fs y dl-PCBs se detectaron generalmente en las ciudades, en comparación a las zonas remotas. Este estudio avala la importancia de los programas de seguimiento a largo plazo que



permitan obtener datos de calidad para poder evaluar y comprender mejor las tendencias temporales de estos contaminantes, así como para poder evaluar con más precisión la eficacia del Convenio de Estocolmo cuyo objetivo fundamental es proteger la salud humana y el medio ambiente frente a los Contaminantes Orgánicos Persistentes.

## PUBLICACIONES DESTACADAS

**Pressurized liquid extraction of *Aglaonema* sp. iminosugars: Bioactivity, cell viability and thermal stability.** S. Rodríguez-Sánchez, A. Martín-Ortiz, C. Carrero-Carralero, S. Ramos, M.L. Sanz, A.C. Soria. *Food Chemistry* 204 (2016) 62-69.

**Applicability of gas chromatography (GC) coupled to triple quadrupole (QqQ) tandem mass spectrometry (MS/MS) for polybrominated diphenyl ether (PBDE) and emerging brominated flame retardants (BFR) determinations in functional foods enriched in omega-3.** A. García-Bermejo, S. Mohr, L. Herrero, M.J. González, B. Gómara. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 64 (2016) 7265-7274.

**Sample preparation of serum for capillary electrophoresis of prostate specific antigen isoforms.** N. Farina-Gomez, S. Barrabes, J.E. Gomez-Lopez, M. Gonzalez, A. Puerta, D. Navarro-Calderon, E. Albers-Acosta, C. Olivier, J.C. Díez-Masa, R. Peracaula, M. de Frutos. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis* 134 (2017) 220-227.

**Characterization of organic aromatic compounds in soils affected by an uncontrolled tire landfill fire through the use of comprehensive two-dimensional gas chromatography–time-of-flight mass spectrometry.** J. Escobar-Arnanz, S. Mekni, G. Blanco, E. Eljarrat, D. Barceló, L. Ramos. *Journal of Chromatography A* 1536 (2018) 163-175.

**Role of Snow Deposition of Perfluoroalkylated Substances at Coastal Livingston Island (Maritime Antarctica).** P. Casal, Y. Zhang, J. W. Martin, M. Pizarro, B. Jiménez, and J. Dachs. *Environmental Science and Technology* 51 (2017) 8460-8470.

## PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS (conferencias invitadas, plenarias, etc.)

**Advances in environmental chemistry linked to separation techniques development: my personal experience.** M. J. González. Conferencia de clausura de la XVI Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) como reconocimiento a su brillante trayectoria profesional y a su contribución al desarrollo de las técnicas de separación en nuestro país. Sevilla. 2 al 4 noviembre de 2016.

**Human exposure to plasticizers. The case of phthalates and their metabolites.** B. Gómara, L. Herrero, M.A. Fernández, J.E. Quintanilla, M.J. González. Conferencia invitada en el “12th Annual LC-MS-MS Workshop on Environmental Applications and Food Safety”. Barcelona. 5-6 de julio de 2016.

**GCxGC in the environmental field: from target to non-target analysis.** Lourdes Ramos. Conferencia Plenaria Inaugural invitada en el 7th Multidimensional Chromatography Workshop. Toronto (Canadá). 5-6 de enero de 2016.

**Maximizing the information from environmental extracts with GCxGC-ToF MS.** L. Ramos. Conferencia invitada en la XXI Reunión de la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA 2017). Valencia. 5-7 de septiembre de 2017.

**Detección de contaminantes relacionados con el envasado y conservación de alimentos.** L. Herrero, J.E. Quintanilla-López, M.J. González, B. Gómara. Conferencia invitada en el IX Congreso CyTA – CESIA. Madrid. 16-19 de mayo de 2017.



**Persistent Organic Pollutants (POPs): Case Studies in the Spanish Environment.** B. Jiménez. Conferencia invitada en el VI International Workshop on Pollutants in the Environment. Rio de Janeiro (Brasil). 4 - 6 julio 2017.

**Analytical methodologies in the search of biomarkers.** M de Frutos, A. Puerta, D. Navarro-Calderon, N. Farina-Gomez, A. Acs, E. Albers-Acosta, C. Olivier, L. Drahos, K. Vekey, J.C. Díez-Masa. Conferencia invitada en el 14th International Interdisciplinary Meeting on Bioanalysis (CECE 2017). Veszprém (Hungria). Octubre 2017.

**Potential of the hyphenation between GC-GC and ToF MS in the environmental field.** L. Ramos, J. Escobar-Arnanz. Conferencia invitada en la Segunda Jornada Científica en Estrategias de Separación en Cromatografía (Univ. Valencia). Valencia (España). Octubre 2017.

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN (en curso en el periodo 2016 - 2018)

**Estrategias avanzadas para la mejora y el control de la calidad y la seguridad de los alimentos (S2013/ABI-3028, AVANSECAL-CM)**

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid (Plan Regional)  
Duración: octubre 2014 - octubre 2017  
Investigadores principales: María Luisa Marina (coordinadora) y Belén Gómara (IP de grupo).

**Avances metodológicos para la obtención de biocidas naturales de uso alimentario basados en extractos de *Mentha* sp. (CIVP17A2843)**

Entidad financiadora: Fundación Ramón Areces  
Duración: 2015 - 2017  
Investigador principal: Ana C. Soria.

**Detección de contaminantes emergentes relacionados con el envasado y conservación de alimentos en productos lácteos (AGL2012-37201)**

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad  
Duración: enero 2013 - junio 2016  
Investigador Principal: Belén Gómara.

**Nuevos y mejores marcadores de cáncer de próstata basados en alteraciones de glicoproteínas estudiadas por técnicas microelectroforéticas (BIOMARCAPROST, CTQ2013-43236-R)**

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad  
Investigadores principales: Mercedes de Frutos y Jose Carlos Díez-Masa  
Duración: enero 2014- diciembre 2017.

**Avances metodológicos en el análisis de mezclas complejas mediante GCxGC (CTQ2012-32957)**

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad  
Duración: 2013 - 2016  
Investigador principal: Lourdes Ramos.

**Desarrollo de una estrategia analítica integradora para la detección de fraudes de calidad y seguridad en complementos alimenticios de plantas para el control del sobrepeso (AGL2016-80475-R).**

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad  
Duración: octubre 2016 - octubre 2019.  
Investigadores principales: M<sup>a</sup> Luz Sanz y Ana C. Soria.

**La Antártida como centinela de la contaminación global. The Antarctic as Sentinel of Global Pollution (SENTINEL, CTM2015-70535-P)**

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad  
Duración: 2016 - 2018  
Investigadores principales: Jordi Dachs Marginet y Begonia Jiménez.

## INVESTIGACIÓN CONTRATADA PÚBLICA (en curso en el periodo 2016 - 2018)

**Acuerdo de encomienda de gestión de la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental y Medio Natural (DGCEAMN) al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) para el desarrollo de actividades sobre compuestos bromados, PFOS y otras nuevas sustancias consideradas en el convenio de Estocolmo, el reglamento (CE) N° 850/2004 y el plan nacional sobre contaminantes orgánicos persistentes (COP). (17caes004).**

Entidad financiadora: Ministerio de Agricultura y Pesca, Alimentación y Medio Ambiente

Clave/Código: Referencia 20175437; Identificador CSIC 170649

Investigador responsable en el centro: Begoña Jiménez.

**Acuerdo de encomienda de gestión entre la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) para la vigilancia de contaminantes orgánicos persistentes y otras sustancias en algunas matrices en zonas costeras de España y otras zonas de interés. Ref. 15CAES004**

Entidad financiadora: MAGRAMA

Investigador responsable (CSIC): Begoña Jiménez

## CONVENIOS CON EMPRESAS (en curso en el periodo 2016 - 2018)

**Synthesis of new functional oligosaccharides**

Entidad financiadora: OPTIBIOTIX (Reino Unido)

Duración: 2015-2016

Investigadores Principales: M<sup>a</sup> Luz Sanz, F. Javier Moreno

**GC-MS analysis of Australian honeys**

Entidad financiadora: CAPILANO (Australia)

Duración: 2015-2016

Investigadores responsables: M<sup>a</sup> Luz Sanz, A. Cristina Soria y Ana I. Ruiz-Matute

**Enzymatic synthesis of prebiotic sweeteners**

Entidad financiadora: OPTIBIOTIX (UK)

Duración: 2016-2017

Investigadores responsables: M<sup>a</sup> Luz Sanz, F. Javier Moreno, Mar Villamiel, Ana I. Ruiz-Matute

**Synthesis of prebiotic sweeteners**

Entidad financiadora: OPTIBIOTIX (UK)

Duración: 2016-2018

Investigadores responsables: M<sup>a</sup> Luz Sanz, F. Javier Moreno

**Análisis de Dioxinas en muestras de aire**

Entidad financiadora: Instituto Biodonostia

Clave/Código: Referencia 20175778; Identificador CSIC 178528

Investigador responsable en el centro: Begoña Jiménez

**Synthesis of sweet functional oligosaccharides (addendum)**

Entidad financiadora: OPTIBIOTIX (Reino Unido)

Duración: 2015-2017

Entidades asociadas: IQOG, CIAL, OPTIBIOTIX

Investigadores responsables: M<sup>a</sup> Luz Sanz, F. Javier Moreno, Ana I. Ruiz-Matute

**Análisis de enantiómeros por electroforesis capilar en muestras de fármacos**

Entidad financiadora: Famasirrea Manufacturing S.L.

Duración: Prórroga anual

Investigador responsable: José Carlos Díez-Masa

## LIBROS Y CAPÍTULOS DE LIBROS

A.I. Ruiz-Matute, M.L. Sanz, F.J. Moreno, M. Corzo-Martínez. "Chromatographic analysis for food authentication", en C.A. Georgiou and G.P. Danezis (eds.), Food authentication: Management, Analysis and Regulation, cap. 8. IFT Press, Wiley-Blackwell, 2017, pp 233-275.

A.C. Soria, M.J. García-Sarrió, A.I. Ruiz-Matute, M.L. Sanz. "Headspace techniques for volatile sampling", en E. Ibáñez y A. Cifuentes (eds), Green extraction techniques: principles, advances and applications. Comprehensive Analytical Chemistry. Volume 76. Elsevier, 2017, pp 255-278.

A.C. Soria, M. Villamiel, A. Montilla. "Ultrasound effects on processes and reactions involving carbohydrates", en M. Villamiel (ed.), Ultrasound in Food Processing: Recent Advances. John Wiley & Sons, Ltd., 2017, pp 437-463.

L. Ramos. "Matrix solid-phase dispersion", en E. Ibáñez and A. Cifuentes (eds.), Comprehensive Analytical Chemistry. Green extraction techniques: principles, advances and applications, Vol: 76. Elsevier. 2017.

## PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

"Composición y procedimiento para extraer beta-lactoglobulina de muestras procesadas y no procesadas y método de inmunoensayo para beta-lactoglobulina" por M. de Frutos, C. Peláez y Á. Puerta. Nº de patente española ES200502938. Licenciada a la Empresa INGENASA en exclusiva para España y no exclusiva para el resto del mundo.

## TESIS DOCTORALES

**Desarrollo de instrumentación y métodos electroforéticos para el análisis de proteínas en microchips.** María del Mar Barrios Romero. Directores: José Carlos Díez-Masa y Agustín González Crevillén. Universidad: Autónoma de Madrid. 2016.

**Avances en el análisis de alimentos mediante técnicas multidimensionales.** Cipriano Carrero Carralero. Directores: María Luz Sanz, Lourdes Ramos. Universidad Autónoma de Madrid. 2018.

**Electroforesis capilar de isoformas de glicoproteínas en fluidos biológicos como potenciales marcadores de cáncer de próstata.** Noemí Fariña Gómez. Directores: Mercedes de Frutos, Jose Carlos Díez-Masa. Universidad Autónoma de Madrid. 2018.

## MÁSTERES DE INVESTIGACIÓN

**La cigüeña blanca (*Ciconia ciconia*) como especie bioindicadora para evaluar la contaminación por retardantes de llama bromados y clorados en la Comunidad de Madrid (2006-2016).** Juan Polo Moreno. Directores: Jose Luis Roscales y Begoña Jiménez. Universidad Complutense de Madrid. 2016.

**Desarrollo de nuevas metodologías para la detección de fraudes de calidad en complementos alimenticios para el control del sobrepeso.** Adal Mena. Directoras: María Luz Sanz, Ana Isabel Ruiz-Matute. Universidad Autónoma de Madrid. 2017.

**Exposición de la cigüeña blanca (*Ciconia ciconia*) a sustancias perfluoralquiladas en la Comunidad de Madrid: variaciones geográficas y temporales (2006-2016).** Marta Pérez Fernández. Directores: Jose Luis Roscales y Begoña Jiménez. Universidad Complutense de Madrid. 2017.

**Prime evidenze sul bioaccumulo di POP in esemplari di poriferi antartici e confronti tra Mare di Ross e Penisola Antartica.**

Nicolas Pala. Directores: Jose Luis Roscales y Begoña Jiménez. Università degli Studi di Siena. 2018.

## TRABAJOS FIN DE GRADO

**Desarrollo de un método enzimático para la obtención de oligosacáridos libres de lactosa procedentes de leche de cabra.**

Rocío Jiménez Franco. Directora: María Luz Sanz. Universidad Rey Juan Carlos. 2017.

**Determinación de los componentes principales por CG-EM de extractos etanólicos de Menta y Minthostachys obtenidos por extracción asistida por microondas (MAE) y evaluación de su bioactividad.**

Juan David Figueroa Alegría y Alejandra Daniela Solarte Sarasty. Directores: Maite del Pilar Rada-Mendoza y Ana Cristina Soria. Universidad del Cauca (Colombia). 2017.

**Aceite esencial de plantas aromáticas: Manzanilla. Especies usadas, composición, variación según procedencia.**

Marcos Fernández Cervantes. Directores: María José Pérez Alonso, María Cervera del Mármol y Ana Cristina Soria. Universidad Complutense de Madrid. 2017.

**Purificación de muestras de aire para el análisis de pesticidas organoclorados.**

Alejandra Arcas Perea. Directores: Juan Muñoz-Ananz y Begoña Jiménez. UNED. 2017.

## OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS

**Capillary electrophoresis of a prostate cancer biomarker. The prostate specific antigen (PSA).**

Trabajo dirigido a Manon Goasdoué para el Proyecto en el Institut Universitaire de Technologie du Mans. Directora: M. de Frutos. Université de Maine (Francia). 2016.

## PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

**Lourdes Ramos.** Elegida por la revista científica "The Analytical Scientist" como una de las 50 mujeres influyentes del mundo en el campo de la Química Analítica por sus trabajos en este campo de investigación (octubre 2016) y como una de los 10 "public defenders" más relevantes del mundo por sus trabajos en defensa del planeta y las personas (2017).

**M<sup>a</sup> José González Carlos.** Profesora de investigación recientemente jubilada del IQOG, recibió el homenaje de la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM) en reconocimiento a su contribución al conocimiento de la contaminación química en los campos medioambiental y alimentario gracias a sus estudios con técnicas de separación y espectrometría de masas (2017).

**M<sup>a</sup> José González Carlos.** Profesora de investigación recientemente jubilada del IQOG, recibió la Medalla de Honor de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) durante la celebración de su XVII Reunión Científica que tuvo lugar en el entorno de las 15as Jornadas de Análisis Instrumental en Barcelona del 3 al 5 octubre de 2017. Esta medalla le fue otorgada como reconocimiento a su brillante trayectoria profesional, a su contribución al desarrollo de las técnicas de separación en nuestro país y a su implicación en la SECyTA, de la que ha sido vocal, vicepresidenta y, en los últimos años de su carrera, presidenta.

**Ana C. Soria.** Nombrada "Colaboradora Honorífica de la Univ. Complutense de Madrid (Fac. CC. Biológicas, Dpto. Biología Vegetal I)" para el curso 2016/2017 y 2017/18, por su colaboración en la actividad docente e investigadora de la Dra. M<sup>a</sup> José Pérez Alonso, profesora de este departamento, en el Máster en Biología Vegetal Aplicada.

**A. Martín, A.I. Ruiz Matute, M.L. Sanz, F.J. Moreno, M. Herrero.** Premio a la segunda mejor comunicación oral por el trabajo titulado



“Development of a HILIC × RP method in two-dimensional liquid chromatography for the analysis of complex carbohydrates samples” presentado en la XVIII Reunión de la Sociedad de Española de Cromatografía y Técnicas Afines (2018).

**A. Martín, A.I. Ruiz-Matute, M.L. Sanz, F.J. Moreno, M. Herrero.** Primer premio a la mejor comunicación en formato póster por el trabajo titulado “A novel methodology for the separation and analysis of bioactive oligosaccharides by comprehensive two-dimensional liquid chromatography” presentado en CIAL-Forum (2018).

## CALIDAD Y CERTIFICACIÓN DE LABORATORIOS

Mantenimiento de la certificación del laboratorio HPLC-CE bajo la norma ISO9001 para la actividad “Identificación de enantiómeros por electroforesis capilar en fármacos” (2016-2018).

## OTROS

### Docencia universitaria

Master Universitario en Química Aplicada. Universidad Autónoma de Madrid. Cursos: 2015/2016, 2016/2017 y 2017/2018.

Prácticas del Grado en Química (UNED). Cursos: 2015/2016, 2016/2017 y 2017/2018.

Master Universitario en Biología Vegetal Aplicada. Universidad Complutense de Madrid. Cursos: 2015/2016, 2016/2017 y 2017/2018.

Máster en Técnicas Cromatográficas en el sector Químico-Farmacéutico. Universidad de Alcalá. Cursos: 2015/2016, 2016/2017 y 2017/2018.

Máster en Toxicología Ambiental y Evaluación de Riesgos. Universidad Rey Juan Carlos. Curso 2016/2017, 2017/2018 y 2018/2019.

Máster en Epidemiología y Salud Pública. Universidad Rey Juan Carlos. Curso 2016/2017.

### Cursos

“Avances en cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Aplicaciones prácticas”. Curso organizado por el IQOG y el Gabinete de Formación del CSIC, y coordinado e impartido por investigadores del grupo AIMAS (2016, 2017 y 2018). Celebrado los días 12-14 de abril de 2016.

“Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Aplicaciones prácticas”. Curso organizado por el IQOG y el Departamento de Postgrado del CSIC, y coordinado e impartido por investigadores del grupo AIMAS (2016, 2017 y 2018).

“Cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas”. Curso organizado por el IQFR y el Gabinete de Formación del CSIC, e impartido con la colaboración de investigadores del grupo AIMAS (2016, 2017 y 2018).

“Probióticos y prebióticos: impacto en la salud”. Curso organizado por el CIAL y el Departamento de Postgrado del CSIC, e impartido por investigadores del grupo AIMAS (2016, 2017 y 2018).

“Nuevas metodologías para el análisis de xenobióticos en alimentos”. Organizado dentro del Programa AVANSECAL de la CM e impartido con la colaboración de investigadores del grupo AIMAS (2017 y 2018).

Curso de Verano “Controlando y mejorando la calidad y la seguridad de los alimentos”. Organizado por la UAH e impartido con la



colaboración de investigadores del grupo AIMAS (2018).

“Avances en cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas para el análisis de muestras complejas”. Organizado por el IQOG y el Instituto de Salud Carlos III (Majadahonda, Madrid) y coordinado e impartido por investigadores del grupo AIMAS (2018).

## Actividades de divulgación

Edición de la revista Cromatografía y Técnicas Afines. Mario Fernández, María Luz Sanz, Ana Cristina Soria (2016, 2017 y 2018).

Contaminantes orgánicos persistentes. Retos y adaptación al PNA. Implicaciones para la industria”. Sede de la Asociación Química y Medioambiental del Sector Químico de la Comunidad Valenciana, QUIMACOVA. 10 de febrero 2016.

Jornada de información y sensibilización sobre contaminantes orgánicos persistentes (COP) y la implantación del plan nacional de aplicación del convenio de Estocolmo y el reglamento CE N° 850/2004”. Facultad de Ciencias, edificio de Biología, Universidad Autónoma de Madrid. 21 de abril 2016.

Jornada informativa para educadores ambientales. CENEAM/ Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente (MAGRAMA). Madrid. 17/05/2016. “Contaminación química, salud y medio ambiente”. Begoña Jiménez.

Contaminantes orgánicos persistentes. Retos y adaptación al PNA. Implicaciones para la industria”. Sede de la Asociación Ibérica de Poliestireno Extruido, AIPEX. 27 de mayo 2016.

Título: La contaminación también viaja

Contribución: Taller

Autores: Jose L. Roscales, Belén González-Gaya, María Ros Rodríguez

Evento: I.E.S Joan Miró, Actividades paralelas para la formación y motivación de los estudiantes de 1º y 2º de Bachillerato.

Entidad/Lugar/Fecha: I.E.S Joan Miró, Madrid, diciembre 2016.

Título: La Antártida interpela nuestro analfabetismo medioambiental  
Contribución: Blog Horizonte Antártida, Entrevista EFE Verde y Divulgación.

Autores: Jose L. Roscales

Referencia: <http://www.horizonteantartida.es/el-gran-laboratorio/la-antartida-interpela-nuestro-analfabetismo-medioambiental/>. Febrero 2017. <http://www.efeverde.com/blog/horizonteantartida/analfabetismo-medioambiental/>. EFE Verde Febrero 2017.

“Lourdes Ramos: Miniaturization is a key factor for a greener Chemistry”. Entrevista Chemical News (Fira de Barcelona, 2017).

Belén Gómara interviene en el video “Programa AVANSECAL” editado por el Canal UNED para La2 de TVE (2017).

<http://www.rtve.es/television/20170526/programacion-uned-la2-dias-2-4-jun-2017/1554443.shtml>.

Título: Salud y Medio ambiente. Contaminantes Orgánicos Persistentes.

Contribución: Charla divulgativa

Autores: Ana I. Sánchez, J. L. Roscales, Mario Fernández, Juan Muñoz-Arnanz, Begoña Jiménez

Referencia: Hospital 12 de Octubre, Madrid. Día Mundial del Medio ambiente. 5 de junio 2018.

Video para Iberdrola, Sección de Medio Ambiente.

Begoña Jiménez.

Descripción del proyecto SENTINEL y los contaminantes orgánicos persistentes.

<https://www.iberdrola.com/te-interesa/medio-ambiente/buque-hesperides-proyecto-sentinel>

Agosto 2018.

Grupo de  
Oligosacáridos y Glicosistemas



Personal

Personal investigador

Dr. José Cristóbal López Pérez

Dra. Ana M. Gómez López

Dra. Clara Uriel Arias

Personal de apoyo

Juan Antonio Ventura Toledano

Marina Rodríguez Yañez

Demián Pardo Filippidis

Personal en formación

Silvia Miranda Alcázar

María del Carmen del Río Alcalde

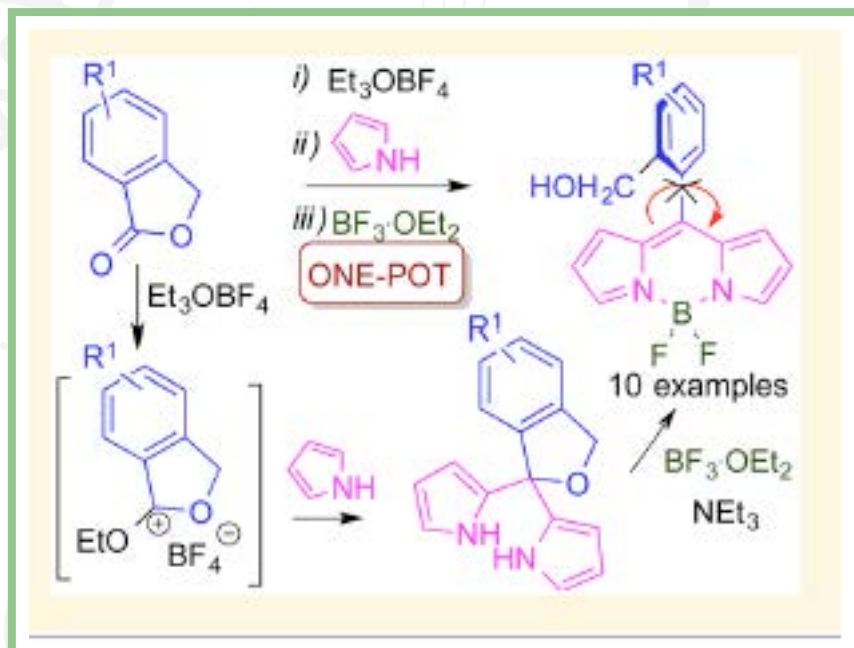
Breve descripción del área de estudios/Objetivo del grupo.

El grupo desarrolla su actividad investigadora en aspectos básicos de la química de carbohidratos con aplicaciones potenciales en biología y biomedicina. Se engloban aspectos como la síntesis de productos bioactivos, el desarrollo de nuevas transformaciones sintéticas basadas en carbohidratos o el estudio de procesos de glicosidación y su aplicación a la obtención de polisacáridos de interés.

En la actualidad además hemos iniciado una línea dirigida al etiquetado fluorescente de biomoléculas centrándonos en el diseño y síntesis de nuevas moléculas fluorescentes conjugables de tipo BODIPY y a su aplicación en temas de interés relacionados con hidratos de carbono y glicoconjugación.

HITOS DESTACADOS

En este periodo se ha diseñado una nueva metodología para la síntesis en escala de gramos de BODIPYs con un punto de anclaje para biomoléculas. Los BODIPYs obtenidos presentan un rendimiento cuántico de fluorescencia óptimo (mayor de 0,7) debido a la restricción en la rotación impuesta en el producto final. La síntesis tiene lugar en una única operación sintética a partir de pirroles y lactonas aromáticas y transcurre con rendimientos iguales o superiores a los observados en procesos relacionados ya conocidos. Este descubrimiento ha sido publicado en Journal of Organic Chemistry 2017, 82, 1240-1247, y abre nuevas posibilidades en el campo de la bioconjugación de moléculas bioactivas con sondas fluorescentes.



También se ha desarrollado una nueva metodología para la dimerización de azido-metil BODIPYs mediante un puente tipo “urea” no estudiado hasta la fecha. La transformación tiene lugar mediante una serie de reacciones (Staudinger, aza-Wittig) que transcurren con rendimientos casi cuantitativos. El interés de estos nuevos derivados radica en su importante absorción y fluorescencia. Este descubrimiento ha sido publicado en Chemistry: A European Journal 2017, 23, 17511-17520, y abre nuevas posibilidades en el campo de los BODIPYs diméricos y bioconjugables.





## PUBLICACIONES DESTACADAS

E. Jiménez-Moreno, L. Montalvillo-Jiménez, A. G. Santana, Ana M. Gómez, G. Jiménez-Oses, F. Corzana, A. Bastida, J. Jiménez-Barbero, Francisco Javier Cañada, I. Gómez-Pinto, C. González and J. L. Asensio, "Finding the Right Candidate for the Right Position: A Fast NMR-Assisted Combinatorial Method for Optimizing Nucleic Acids Binders". *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 6463-6474.

C. Uriel, P. Rijo, A. S. Fernandes, A. M. Gómez, B. Fraser-Reid, J. C. López, "Methyl 1,2-Orthoesters in Acid-Washed Molecular Sieves Mediated Glycosylations". *Chemistry Select* **2016**, 6011-6015.

A. M. Gómez, F. Lobo, J. C. López, "Pyranose glycals in the generation of skeletal diversity". *Specialist Periodical Reports, Carbohydrate Chemistry*, Vol 41, **2016**, 26-58.

J. Cristóbal López, M. del Río, A. Oviden, J. Bañuelos, I. López-Arbeloa, I. García-Moreno, and Ana M. Gómez, "Solvent-Sensitive Emitting Urea-Bridged bis-BODIPYs: Ready Access by a One-Pot Tandem Staudinger/Aza-Wittig Ureation". *Chemistry a European Journal* **2017**, 23, 17511-17520 (hot paper, Inside cover DOI: 10.1002/chem.201704232).

M. del Río, F. Lobo, J. Cristóbal López, A. Oviden, J. Bañuelos, I. López-Arbeloa, I. Garcia-Moreno, and Ana M. Gómez, "One-Pot Synthesis of Rotationally Restricted, Conjugatable, BODIPY Derivatives from Phthalides". *J. Org. Chem.* **2017**, 82, 1240-1247.

S. Miranda, F. Lobo, Ana M. Gómez, J. Cristóbal López, "Ferrier-Nicholas Cations from C-3-Alkynylglycals: Access to C-3-Branched Allylic Glycosides and Ring-Opening Derivatives". *E. J. Org. Chem.* **2017**, 2501-2511.

A. M. Gómez, F. Lobo, J. C. López, "Ferrier rearrangement: an update on recent developments". *Specialist Periodical Reports, Carbohydrate Chemistry*, Vol 42, **2017**, 10-24.

S. Miranda, Ana M. Gómez y J. Cristóbal López, "Diversity-Oriented Synthetic Endeavors of Newly Designed Ferrier and Ferrier-Nicholas Systems Derived from 1-C -Alkynyl-2-deoxy-2-C -Methylene Pyranosides". *European Journal of Organic Chemistry*, **2018**, 5355-5374.

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

**Título del proyecto:** Aplicaciones sintéticas de carbohidratos: generación de diversidad y complejidad estructural. Preparación de oligosacáridos y fragmentos de ARN.

Referencia del proyecto: CTQ-2012-32114.

Entidad financiadora: Dirección General de Investigación Científica y Técnica. Ministerio de Economía y Competitividad.

Entidades participantes: CSIC.

Duración: Enero 2013 - Diciembre 2016.

Investigador responsable: Jose Cristóbal López Pérez.

Número de investigadores participantes: 3.

Importe total del proyecto: 64.000 Euros.

**Título del proyecto:** Carbohidratos y Sondas Fluorescentes como herramientas en Química y Biología: Aplicación en terapia fotodinámica y partículas magnéticas.

Entidad financiadora: Dirección General de Investigación Científica y Técnica. Ministerio de Economía y Competitividad.

Referencia: CTQ-2015-66702.

Entidades participantes: CSIC.

Duración: Enero 2016 - Diciembre 2018

Tipo de participación: investigador principal 2.

Número de investigadores participantes: 3.

Cuantía de la subvención: 78.650 Euros.

**Título del proyecto:** Aromatic stacking in glycochemistry: Can glycosyl cations be tamed?.

Entidad financiadora: Mizoutani Foundation for Glycoscience.

Referencia del proyecto: 17-0045.

Entidades participantes: CSIC.

Duración: Abril 2017 - Marzo 2018.

Investigador responsable: Juan Luis Asensio Álvarez.

Número de investigadores participantes: 5.

Importe total del proyecto: 40.000 Euros.

## TESIS DOCTORALES

**Desarrollo de nuevas estrategias para la síntesis de nucleósidos y de sondas fluorescentes conjugables.**

María del Carmen del Río Alcalde. Directores: Drs. Ana M. Gómez y José Cristóbal López Pérez. Universidad de Alcalá. Facultad de CC Químicas. 7/2017.

## MÁSTERES DE INVESTIGACIÓN

**“Nuevas sondas fluorescentes de interés biológico”.**

Laura Díaz Casado.

Universidad Complutense. Facultad de CC Químicas. 7/2017.

Directores: Drs. Ana M. Gómez y José Cristóbal López Pérez.

**“Desarrollo de nuevos fluoróforos conjugables a moléculas de interés”.**

María Alejandra González Buitrago.

Universidad de Alcalá. Facultad de CC Químicas. 7/2017.

Directores: Drs. Clara Uriel y José Cristóbal López Pérez.

**“Synthèse et caractérisation de dérivés du BODIPY”.**

Hadrianna Suffrin.

Université Joseph Fourier Grenoble. IUT Chimie et Materiaux. 6/2017.

Directores: Dr. Clara Uriel.

**“Desarrollo de nuevas sondas fluorescentes basadas en BODIPYs para su empleo en terapia fotodinámica”.**

Raul Mozas Irizar.

Universidad de Alcalá. Facultad de CC Químicas. 7/ 2016.

Directores: Drs. Ana M. Gómez y José Cristóbal López Pérez.

**“Síntesis de nuevas sondas fluorescentes basadas en BODIPYs”.**

Rut Martínez Moro.

Universidad de Alcalá. Facultad de CC Químicas. 7/2016.

Directores: Drs. Ana M. Gómez y José Cristóbal López Pérez.

**“Diseño de nuevas sondas fluorescentes de interés biológico”.**

Ana Milián López.

Universidad de Alcalá. Facultad de CC Químicas. 7/2016.

Directores: Drs. Ana M. Gómez y José Cristóbal López Pérez.

**“Synthèse d’oligosaccharides et de glycoconjugués d’intérêt biologique”.**

Neven Tillet.

Université Joseph Fourier Grenoble. UT Chimie et Materiaux.

6/2016.

Directores: Dr. Clara Uriel.



## Grupo de Glicoquímica Biológica



### Personal

#### Personal investigador

**Julia Revuelta Crespo**

**Agatha Bastida Codina**

**Eduardo García-Junceda Redondo**

**Alfonso Fernández-Mayoralas Álvarez**

#### Personal de apoyo

Raúl Benito Arenas

Sandra Zárate

María Luisa de la Cruz

Esther Martínez Fernández

Elena Trapero Jiménez-Tajuelo

Guillermo Corrales Morales

#### Personal en formación

Mitch Vrolijkx

Arnau Clement

Roberto Fuertes

Irene Martín Mejías

Pilar Montero Calle

Eduardo García Calvo

Amaya Gómez de Vírjala

Lourdes Jacoba Castillo García

Mariano José Nigro

Alexia Monnier

Cristian Hurtado Anciano

Amaya Gómez de Virgala

Alberto Carnicero

Miguel López Gestoso

Rodrigo Pavón Bernabé

Alejandro López

Jenny Barato Garrido

Estefanía Tiburcio Fortes

Jazmin Marisela Morales

### Breve descripción del área de estudios/Objetivo del grupo.

Pretendemos entender cómo influye el patrón de sulfatación de los glicosaminoglicanos (GAGs) del sistema nervioso central (SNC), en su interacción con proteínas neurotróficas. Para ello, llevamos a cabo la síntesis de GAGs y análogos mediante el empleo de métodos químicos y enzimáticos. El objetivo último es el desarrollo de biomateriales para la regeneración/reparación del SNC lesionado.

## HITOS DESTACADOS

**Volumen especial de la revista *Biocatalysis and Biotransformation*:** Eduardo García-Junceda junto con los Dres. Alcántara, Gotor y Plou, han editado el número especial “Biotatálisis en España: un campo de éxito e innovación” de la revista *Biocatalysis and Biotransformation*.

### Participación en el XVII Congreso Europeo de Biotecnología:

La Dra. Agatha Bastida presentó el póster titulado “Preparación de derivados de condroitina para el reconocimiento del factor neurotrófico” y el Dr. García-Junceda dio una comunicación oral titulada “Preparación quimioenzimática de condroitín sulfatos con un patrón de sulfatación definido”.

## PUBLICACIONES DESTACADAS

Sánchez-Moreno, I., García-Junceda, E., Hermida, C., Fernández-Mayoralas, A. Development of a new method for D-xylose detection and quantification in urine, based on the use of recombinant xylose dehydrogenase from *Caulobacter crescentus*. *J. Biotechnol.*, 234, 50-57 (2016). DOI: 10.1016/j.jbiotec. 2016.07.019.

Latorre, M., Revuelta, J., García-Junceda, E., Bastida, A. 6-O-Nucleotidyltransferase: an aminoglycoside-modifying enzyme specific for streptomycin/streptidine. *Med. Chem. Commun.*, 7, 177-

183 (2016). DOI: 10.1039/c5md00496a.

Sanchez-Moreno, I., Hélaïne, V., Poupard, N., Garcia-Junceda, E., Wohlgemuth, R., Guérard-Hélaïne, C., and Lemaire, M. One-Pot Tandem Enzymatic Reactions for Efficient Biocatalytic Synthesis of D-Fructose-6-Phosphate and Analogs. Chapter 8; Section 8.7. *Practical Methods in Biocatalysis and Biotransformations 3*. Whittall, J., Sutton, P. W., and Kroutil, W. (eds). pp 232-239. 2016 John Wiley & Sons, Ltd. DOI: 10.1002/9781118697856.ch08.

Santana, A. G., Zárate, S. G., Asensio, J.L., Revuelta, J., Bastida, A. Selective modification of the 3'-amino group of Kanamycin prevents significant loss of activity in resistant bacterial strains. *Org. Biomol. Chem.*, 14, 516-525 (2016).

Jiménez-Moreno, E., Montalvillo-Jiménez, L., González Santana, A., Gómez, A., Jiménez-Osés, G., Corzana, F., Bastida, A. Jiménez-Barbero, J., Cañada, F.J., Gómez-Pinto, I., González, C., Asensio, J.L. Finding the Right Candidate for the Right Position: A Fast NMR-assisted Combinatorial Method for Optimizing Nucleic Acids Binders. *J. Am. Chem. Soc.* 25, 6463-6474 (2016).

Bastida, A., Revuelta, J. Design, synthesis and biological evaluation of heterocyclic aminoglycosides. *Targets in heterocyclic systems: Chemistry and properties (collection)*. Royal Society of Chemistry. Vol. 19 214-238 (2016).

Redondo, J. A., Martínez-Campos, E., Navarro, R., Corrales, G., Pandit, A., Reinecke, H., Gallardo, A., López-Lacomba, J. L., Fernández-Mayoralas, A., Elvira, C. Polymeric gene carriers bearing pendant  $\beta$ -cyclodextrin: The relevance of glycoside permethylation on the 'in vitro' cell response. *Macromol. Rapid Commun.* 37 575-583 (2016).

M. Pintado-Sierra, I. García-Álvarez, A. Bribián, E.M. Medina-Rodríguez, R. Lebrón-Aguilar, L. Garrido, F. de Castro, A. Fernández-

Mayoralas, J.E. Quintanilla-López. A comprehensive profiling of sulfatides in myelin from mouse brain using liquid chromatography-tandem mass spectrometry and high resolution accurate mass spectrometry. *Anal. Chim. Acta* 951 (2017) 89-98.

A. S. de León, N. Vargas-Alfredo, A. Gallardo, A. Fernández-Mayoralas, A. Bastida, Agatha; A. Muñoz-Bonilla, J. Rodríguez-Hernandez. Microfluidic reactors based on rechargeable catalytic porous supports: Heterogeneous enzymatic catalysis via reversible host-guest interactions. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 9 (2017) 4184-4191.

E. Punzón, F. García-Alvarado, M. Maroto, C. Fernandez-Mendivil, P. Michalska, I. García-Álvarez, J. A. Arranz-Tagarro, I. Buendía, M. G. López, R. León, L. Gandía, Alfonso Fernández-Mayoralas, A. G. García. Novel sulfoglycolipid IG20 causes neuroprotection in rat hippocampal slices *Neuropharmacol.* 116 (2017) 110-121.

A. del Prado, M. Pintado-Sierra, M. Juan-Y-Seva, R. Navarro, H. Reinecke, J. Rodríguez-Hernández, C. Elvira, A. Fernández-Mayoralas, A. Gallardo. Aqueous micro and nanoreactors based on alternating copolymers of phenylmaleimide and vinylpyrrolidone bearing pendant L-proline stabilized with PEG grafted chains. *J. Polym. Sci., Part A.* 55 (2017) 1228-1236.

J. A. Redondo, E. Martínez-Campos, R. Navarro, M. Pérez-Perrino, H. Reinecke, A. Gallardo, G. Corrales, A. Fernández-Mayoralas, C. Elvira. Hydroxyl versus permethylated poly-pseudosaccharides as gene carriers. *Eur. J. Pharm. Biopharm.*, 117 (2017) 68-76.

I.I Sánchez-Moreno, C. Monsalve-Hernando, A. Godino, L. Illa, M. J. Gaspar, G. M.I Muñoz, A. Díaz, J. L. Martín, E. García-Junceda, A. Fernández-Mayoralas, C. Hermida. Analytical validation of a new enzymatic and automatable method for D-xylose measurement in human urine samples. *BioMed Res Intentl.*, (2017), article ID: 8421418.

R. Benito-Arenas, E. Doncel-Pérez, M. Fernandez-Gutierrez, L. Garrido, E. García-Junceda, J. Revuelta, A. Bastida, A. Fernández-Mayoralas. A holistic approach to unravelling chondroitin sulfation: Correlations between surface charge, structure and binding to growth factors. *Carbohydrate Polymers*, 202, 211-218, 2018.

J. Revuelta, R. Fuentes, L. Lagartera, M.J. Hernaiz, A. Bastida, E. García-Junceda, A. Fernández-Mayoralas. Assembly of glycoamino acid building blocks: a new strategy for the straightforward synthesis of heparan sulfate mimics. *Chemical Communications*, 54, 13455, 2018.

E. Doncel-Pérez, I. Aranaz, A. Bastida, J. Revuelta, C. Camacho, N. Acosta, L. Garrido, C. Civera, E. García-Junceda, A. Heras, A. Fernández-Mayoralas. Synthesis, physicochemical characterization and biological evaluation of chitosan sulfate as heparan sulfate mimics. *Carbohydrate Polymers*, 191, 225, 2018.

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

**“Systems Biocatalysis” . Ref: CM1303. Working Group II: Routes to New Key Metabolites.** <http://cost-sysbiocat.fkit.hr>.

Entidad Financiadora: COST (European Cooperation in Science and Technology).

Duración: noviembre 2013 - noviembre 2017.

Participante: Eduardo García-Junceda.

Group Leader: Roland Wohlgemuth

Chair of the action: Stefano Servi.

**Hidrogel funcionalizados con derivados de glicosaminoglicanos: preparación y estudio de sus propiedades en células y tejidos neurales. (MAT2015-65184-C2-2-R).**

Entidad Financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad.

Duración: 1 enero 2016 - 31 diciembre 2018.

Grupos Participantes: UCM; CSIC.

IP Grupo CSIC: Leoncio Garrido Fernández y Alfonso Fernández-Mayoralas Álvarez.

Coordinador: Ángeles Heras (UCM).

**Desarrollo de un nuevo método para la detección de xilosa en suero sanguíneo basado en la acción combinada de dos enzimas.**

Entidad Financiadora: VENTER PHARMA S.L.

Duración: 1 de julio 2015 - 31 diciembre 2016.

IP: Alfonso Fernández-Mayoralas Álvarez.

**Desarrollo sistemas enzimáticos con vistas a la mejora del método diagnóstico de hipolactasia basado en Gaxilosa (LacTEST).**

Entidad Financiadora: VENTER PHARMA S.L.

Duración: 23 enero 2017 - 22 enero 2018.

IP: Alfonso Fernández-Mayoralas Álvarez.

**Formación avanzada Experimental de la universidad de Sucre en Bolivia y Preparación de un curso de Doctorado conjunto (COOPB20237).**

Entidad Financiadora: CSIC.

Entidades asociadas: CSIC, Univerisdad Sucre (Bolivia).

IP: Agatha Bastida Codina.

## PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

**Inventores:** J A. Gallardo Ruiz, A. Fernandez-Mayoralas, A. Bastida-Codina, J. Rodríguez-Hernández.

**Título:** Microchips porosos funcionalizados y su uso en la elaboración de sensores.

**Número de Aplicación:** P201631683.

**Año:** 2016

**Propietarios:** CSIC.

**Países:** España.

## TRABAJOS FIN DE GRADO

**Optimización de la expresión de la 6-O-Sulfotransferasa de Sinorhizobium meliloti para la sulfatación regioselectiva de derivados de condroitín sulfato.**

Amaya Gómez de Vír gala.

Universidad de Castilla la Mancha. Curso 2016/2017.

Directores: Eduardo García-Junceda.

**Hacia el desarrollo de sulfotransferasas autosuficientes.**

Lourdes Jacoba Castillo García.

Complutense de Madrid. Curso 2016/2017.

Directores: Eduardo García-Junceda y Agatha Bastida.

**Synthesis of heparan 3-O-sulfate.**

Mitch Vrolijkx.

Universidad de Lovaina (Bélgica). Período: febrero - junio 2016

Director: Alfonso Fernández-Mayoralas Álvarez.

## MÁSTERES DE INVESTIGACIÓN

**Desarrollo de nuevos métodos biocatalíticos para la síntesis de glicosaminoglicanos con patrón de sulfatación definido.**

Pilar Montero Calle.

Complutense de Madrid. Marzo 2017.

Directores: Eduardo García-Junceda y Agatha Bastida.

**Síntesis de glicoaminoácidos para la regeneración de tejido nervioso dañado.**

Irene Martín Mejías.

Universidad Autónoma de Madrid. Período: febrero - julio 2016

Director: Alfonso Fernández-Mayoralas Álvarez.



## Síntesis de glicoaminoácidos: Miméticos de heparan sulfatos.

Roberto Fuertes.

Universidad Autónoma de Madrid. Período: febrero - julio 2017.

Director: Julia Revuelta.

## PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

Eduardo García-Junceda. Profesor de la asignatura Biotatálisis aplicada y biotransformaciones del Máster en Biotecnología Industrial y Ambiental. Departamento de Bioquímica y Biología Molecular I (UCM).

Eduardo García-Junceda. Coordinador de la Sección de Biotatálisis Aplicada de la Sociedad Española de Biotecnología (SEBiot).

Eduardo García-Junceda, Miembro del Comité Científico I Congreso Iberoamericano de Biotecnología (Bio.Iberoamérica2016).

Eduardo García-Junceda, Miembro Comité Científico BIOTEC 2017.

La Dra. Daniela Gamemara, del Grupo de Síntesis Enantioselectiva de Compuestos Bioactivos (SECoBi) de la Universidad de la República (Uruguay), ha realizado una estancia de 4 meses en nuestro grupo para trabajar en el tema “Desarrollo de procesos sintéticos que involucran aldolasas como biocatalizadores para la preparación de azúcares modificados”.

Agatha Bastida. Profesora del taller de Biotecnología Avanzada y del curso de Biología Molecular en la UFJX Sucre (Bolivia), Octubre (2016).

Agatha Bastida y Julia Revuelta. Forman parte del claustro docente del Doctorado en Ciencias Biomédicas de la UFJX Sucre Bolivia.

Julia Revuelta. Experto técnico de ACIE (Agencia de Certificación en

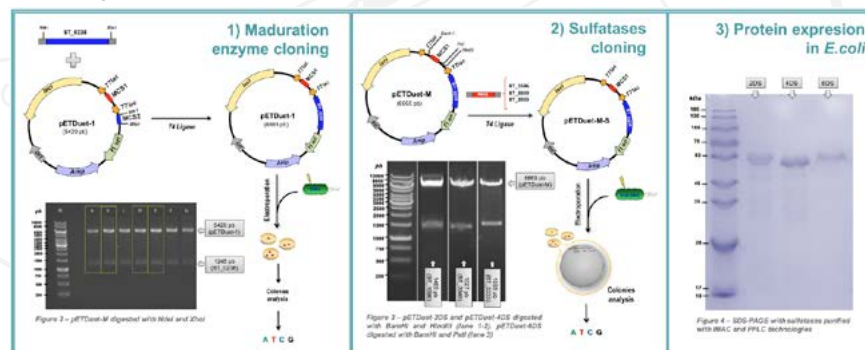
Innovación Española). Desde el año 2014 formo parte del equipo de expertos evaluadores de proyectos para la aplicación de incentivos fiscales de I+D+i. Desde mi incorporación a esta red científica he participado en la evaluación de más de 50 proyectos. Desde el año 2016 soy miembro del Comité Científico de dicha institución, como responsable del área de Química Farmacéutica.

Alfonso Fernández-Mayoralas. “Coordinador y ponente de la sesión “New ligands and drugs for brain disease” del curso “XV Summer Teófilo Hernando’s School of Pharmacology of the Menéndez Pelayo’s International University”. (Julio 25 - 29, 2016, Santander).

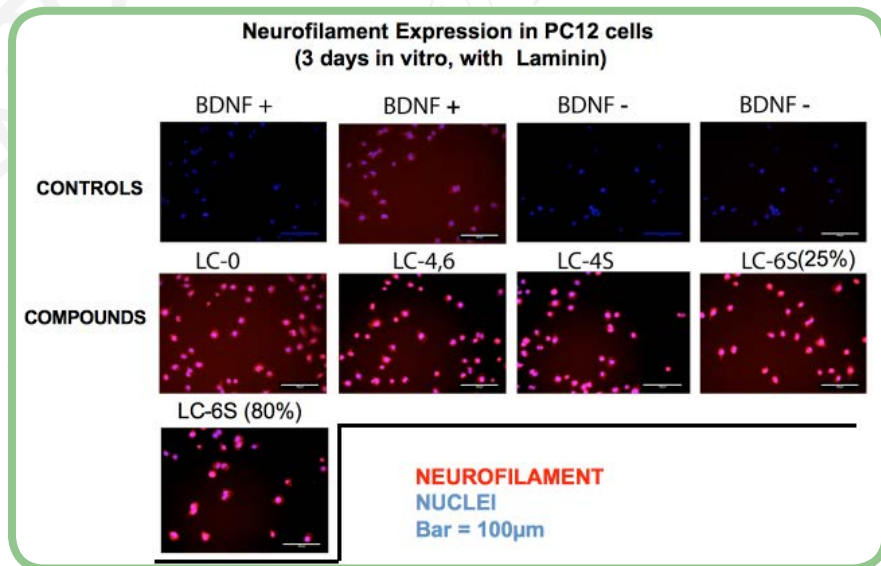
Alfonso Fernández-Mayoralas. Participante (2 horas) en la asignatura de Química Orgánica Biológica del Máster en Química Orgánica de la Universidad Autónoma de Madrid, del curso 2016-2017, con la conferencia: “Biotatálisis en síntesis de carbohidratos con aplicaciones biomédicas: desde el laboratorio a la creación de una empresa”.

Alfonso Fernández-Mayoralas. Participante (2 horas) en la asignatura de Química Orgánica Biológica del Máster en Química Orgánica de la Universidad Autónoma de Madrid, del curso 2017-2018, con la conferencia: “De la química a la biología, un viaje de ida y vuelta: Reacciones bioortogonales y síntesis enzimática”.

## Cloning of a 4-O-endosulfatase from *Bacteroides thetaiotaomicron*







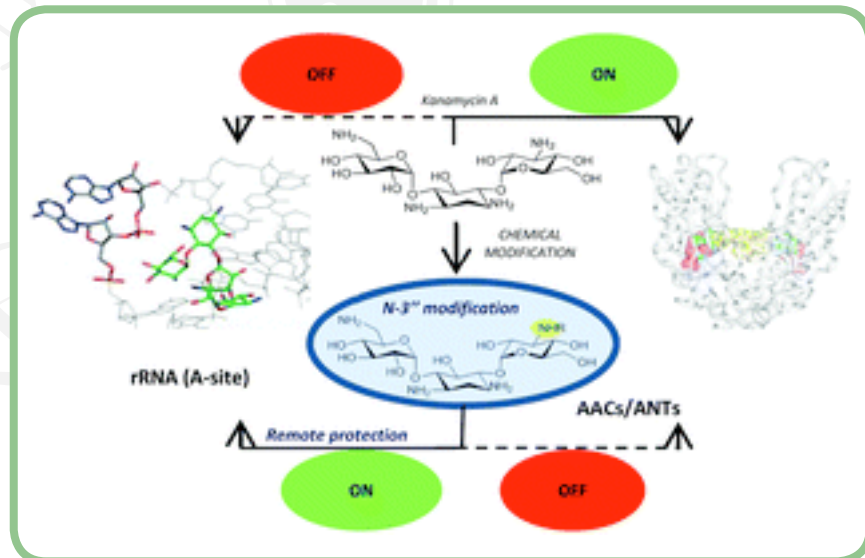
## OTROS

### Actividades de divulgación

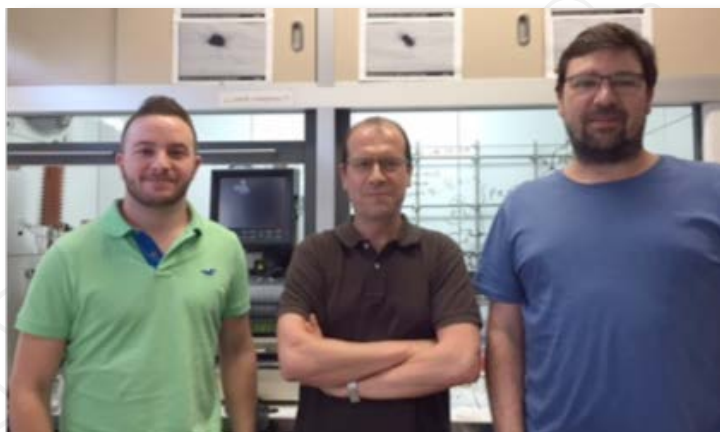
**Taller: “Ciencia Divertida”.** O. García (ICTP-CSIC) y J. Revuelta (IQOG-CSIC). Colegio Corazón Inmaculado, Madrid. 4 de noviembre de 2018.

**Taller: “Ciencia en Femenino”.** J. Revuelta. IES Ramiro de Maeztu. 8 de marzo de 2018.

**Selective modification of the 3'-amino group of Kanamycin prevents significant loss of activity in resistant bacterial strains**



## Grupo de Glicomiméticos y Nanomateriales



### Personal

#### Investigadores en plantilla

José Luis Chiara

#### Personal técnico

Enrique Mann

#### Personal en formación

Alberto Blázquez-Moraleja

Nuestra investigación tiene como objetivo el diseño, síntesis y estudio de nuevos materiales moleculares y nanoestructurados para aplicaciones biomédicas y fotónicas avanzadas. Para este objetivo,

el grupo colabora activamente con grupos de fotofísica (Prof. I. López-Arbeloa, UPV), láser (Prof. I. García-Moreno, IQFR-CSIC), biomedicina (Dr. M. D. Chiara, Instituto de Oncología de Asturias-Universidad de Oviedo) y bionanomateriales (Prof. O. J. Rojas, Aalto University, Finlandia), con los que compartimos proyectos y personal en formación en un entorno multidisciplinar.

### HITOS DESTACADOS

Un nuevo tipo de colorantes fluorescentes del grupo de los BODIPY con estructura B-espiránica rígida, diseñados y sintetizados en el grupo, han demostrado ser los primeros fluoróforos que muestran agregación de tipo J en disolventes orgánicos puros. Gracias a su rigidez estructural, los nuevos colorantes presentan además fotoestabilidades y rendimientos cuánticos muy elevados y una alta eficiencia láser con emisión dual.

El grupo ha descrito también la preparación del primer nanocubo de geometría Janus (es decir, con dos caras opuestas químicamente distintas) y estructura bien definida. Para ello, se ha desarrollado una aproximación sintética basada en una reacción “click” múltiple y altamente eficiente controlada por simetría.

### PUBLICACIONES DESTACADAS

H. Manzano, I. Esnal, T. Marques-Matesanz, J. Bañuelos, I. López-Arbeloa, M. J. Ortiz, L. Cerdán, A. Costela, I. García-Moreno, J. L. Chiara. “Unprecedented J-Aggregated Dyes in Pure Organic Solvents”. *Adv. Funct. Mater.* **2016**, 26, 2756–2769 (DOI: 10.1002/adfm.201505051).

A. Blazquez-Moraleja, M. E. Pérez-Ojeda, J. R. Suárez, M. L. Jimeno, J. L. Chiara. “Efficient multi-click approach to well-defined two-faced octasilsesquioxanes: the first perfect Janus nanocube”. *Chem. Commun.* **2016**, 52, 5792–5795 (DOI: 10.1039/c6cc00896h).

I. Sáenz-de-Santa-María, C. Bernardo-Castiñeira, E. Enciso, I. García-Moreno, J. L. Chiara, C. Suárez, M. D. Chiara. "Control of long-distance cell-to-cell communication and autophagosome transfer in squamous cell carcinoma via tunneling nanotubes". *Oncotarget* **2017**, 8, 20939–20960 (DOI: 10.18632/oncotarget.15467).

A. Blázquez-Moraleja, L. Cerdán, I. García-Moreno, E. Avellanal-Zaballa, J. Bañuelos, M. L. Jimeno, I. López-Arbeloa, J. L. Chiara. Stereochemical and Steric Control of Photophysical and Chiroptical Properties in Bichromophoric Systems. *Chemistry A European Journal*, 24, 3802-3815 (2018).

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

**Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados sensibilizados con colorantes para aplicaciones optoelectrónicas y biomédicas (MAT2014-51937-C3-1-P).**

Entidad financiadora: MINECO

Entidades participantes: Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC), Instituto de Química-Física Rocasolano (IQFR-CSIC), Universidad Complutense de Madrid, Universidad del País Vasco.

Duración: 01-01-2015 hasta: 31-12-2017

Investigadores responsable y coordinadores: Jose Luis Chiara (IQOG-CSIC); Inmaculada García-Moreno (IQFR-CSIC).

**Materiales fotónicos como marcadores en bioimagen (MAT2015-68837-REDT).**

Entidad financiadora: MINECO.

Entidades participantes: Instituto de Química-Física Rocasolano (IQFR-CSIC), Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC), Universidad Complutense de Madrid, Universidad del País Vasco, Hospital Universitario de Asturias.

Duración: 01-01-2015 hasta: 31-12-2016.

Investigadora responsable: Inmaculada García-Moreno (IQFR-CSIC).

**Bactericidas nanomecánicos basados en celulosa para desinfección de aguas (EUN2017-85422).**

Entidad financiadora: MINEICO.

Entidades participantes: Instituto de Química-Física Rocasolano (IQFR-CSIC), Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC).

Duración: 01-01-2017 hasta: 31-12-2018.

Investigador responsable: Jose Luis Chiara (IQOG-CSIC).

**Materiales fotónicos "diseñados a medida" como marcadores avanzados para bioimagen (MAT2017-83856-C3-1-P).**

Entidad financiadora: MINEICO.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad del País Vasco.

Investigador responsable: Jose Luis Chiara Romero.

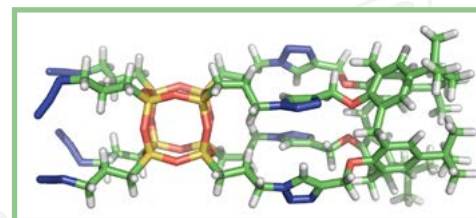
## PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

**Compuestos y sus usos como sondas fluorescentes. Nº de solicitud: P201730885.**

Inventores: J. L. Chiara, I. García Moreno, A. Blázquez-Moraleja, M. D. Chiara, I. Sáenz de Santa María.

País de prioridad: España.

Fecha de prioridad: 04-07-2017



"The First Perfect Janus Nanocube"  
(*Chem. Commun.* 2016, 52, 5792–5795)



## Grupo de Glicoquímica y Reconocimiento Molecular



### Personal

#### Investigadores en plantilla

Juan Luis Asensio Alvarez

#### Postdoctorales

Andrés González Santana

#### Personal en formación

Laura Montalvillo Jiménez

Laura Diaz-Casado

Los trabajos del grupo de glicoquímica y reconocimiento molecular del IQOG se centran en el estudio de procesos de reconocimiento molecular que involucran carbohidratos desde una perspectiva bio-orgánica. Los objetivos específicos del grupo durante los años

2016-2017 se resumen en los siguientes epígrafes:

- Enlaces CH/ $\pi$  en glicoquímica: modulación de reacciones de glicosilación mediante interacciones de apilamiento con sistemas aromáticos
- Estudio sobre fenómenos de cooperatividad en redes de enlaces CH/ $\pi$
- Desarrollo de nuevos métodos basados en RMN para el cribado de librerías de ligandos de ARN/ADN.

### HITOS DESTACADOS

El desarrollo de ligandos potentes y selectivos a partir de armazones de baja selectividad representa uno de los retos más exigentes en el desarrollo de nuevas drogas (tanto por su coste económico como en tiempo). En el año 2016 hemos descrito una nueva estrategia, desarrollada en el grupo, basada en química combinatoria para la optimización de armazones poli-aminados multivalentes como ligandos de ADN o ARN selectivos.

El protocolo desarrollado proporciona acceso rápido a una gran variedad de librerías de regioisómeros cuya selectividad por una diana dada puede evaluarse en un segundo paso, combinando experimentos de micro-diálisis, marcaje isotópico y Resonancia Magnética Nuclear. Con objeto de ilustrar nuestra estrategia, hemos preparado 20 pequeñas librerías que comprenden 100 nuevos derivados del antibiótico kanamicina-B y hemos evaluado sus propiedades de asociación a la diana de RNA ribosómico conocida como sitio-A.

Contrariamente a la visión convencional de la RMN como una técnica limitada en el cribado de librerías, en este trabajo demostramos que constituye una valiosa alternativa para la detección y cuantificación de mezclas complejas, incluso cuando están integradas por derivados estructuralmente relacionados (una situación común en el contexto de la optimización de fármacos).

Adicionalmente, el trabajo desarrollado ha permitido la identificación de un nuevo derivado de kanamicina dotado de mayor selectividad por su diana biológica.



## PUBLICACIONES DESTACADAS

*"Finding the Right Candidate for the Right Position: A Fast NMR-assisted Combinatorial Method for Optimizing Nucleic Acids Binders"*

Ester Jiménez-Moreno, Laura Montalvillo-Jiménez, Andrés G. Santana, Ana M. Gómez, Gonzalo Jiménez-Osés, Francisco Corzana, Agatha Bastida, Jesús Jiménez-Barbero, Francisco Javier Cañada, Irene Gómez-Pinto, Carlos González, Juan Luis Asensio\*

**J. Am. Chem. Soc.** (2016), 138, 20, 6463

*"The Use of Fluoroprolin in MUC1 Antigen Enables Efficient Detection of Antibodies in Patients with Prostate Cancer"*

Víctor J. Somovilla, Iris A. Bermejo, Ines S. Albuquerque, Nuria Martínez-Saéz, Jorge Castro-López, Fayna García-Martín, Ismael Compañón, Hiroshi Hinou, Shin-Ichiro Nishimura, Jesús Jiménez-Barbero, Juan L. Asensio, Alberto Avenoz, Jesús H. Busto, Ramón Hurtado-Guerrero, Jesús M. Peregrina, Gonzalo J. L. Bernardes,\* and Francisco Corzana\*

**J. Am. Chem. Soc.** (2017), 139, 18255-18261

*"Mucin architecture behind the immune response: design, evaluation and conformational analysis of an antitumor vaccine derived from an unnatural MUC1 fragment"*

Nuria Martínez-Sáez, Nitin T. Supekar, Magreet A. Wolfert, Iris A. Bermejo, Ramón Hurtado-Guerrero, Juan Luis Asensio, Jesús Jiménez-Barbero, Jesús H. Busto, Alberto Avenoz, Geert-Jan Boons, Jesús M. Peregrina, and Francisco Corzana\*

**Chemical Science** (2016), 7, 2294-2301.

*"Water Sculpts the Distinctive Shapes and Dynamics of the Tumor-Associated Carbohydrate Tn Antigens: Implications for Their Molecular Recognition"*

Iris A. Bermejo, manol Usabiaga, Ismael Compañón, Jorge Castro-López, Aran Insausti, José A. Fernández, Alberto Avenoz, Jesús H. Busto, Jesús Jiménez-Barbero, Juan L. Asensio, Jesús M. Peregrina, Gonzalo Jiménez-Osés, Ramón Hurtado-Guerrero, Emilio J. Cocinero, Francisco Corzana

**J. Am. Chem. Soc.** (2018), 140, 31, 9952-9960

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Referencia: CTQ2016-79255-P

Título Del Proyecto: **Estudios sobre reconocimiento molecular de glicósidos: bases moleculares y optimización de compuestos bio-activos.**

Entidad Financiadora: Ministerio de Economía y competitividad

Investigador Principal: Dr. Juan Luis Asensio.

Duración: 30/12/2014-29/12/2019

Financiación recibida: 159720€

Referencia del proyecto: 17-0045

Título Del Proyecto: **Aromatic stacking in glycochemistry: Can glycosyl cations be tamed?**

Entidad Financiadora: Mizutani Foundation for Glycosciences

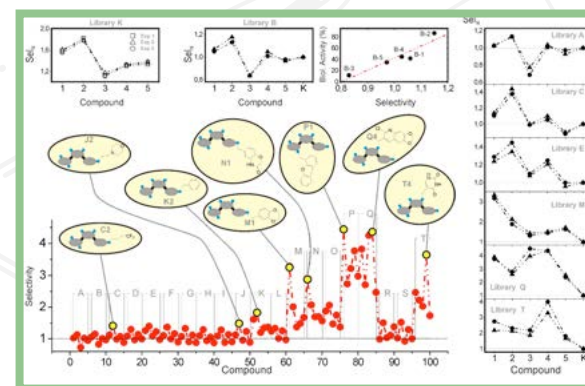
Investigador Principal: Juan Luis Asensio Alvarez.

Duración: 01/04/2017-1/4/2018

Financiación recibida: 40000€

## PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

Medalla José Barluenga concedida por el grupo de Química Orgánica de la RSEQ 2017.



## Grupo de Sistemas Insaturados



### Personal

#### Profesor de investigación

Pedro Almendros Requena

#### Predoctorales

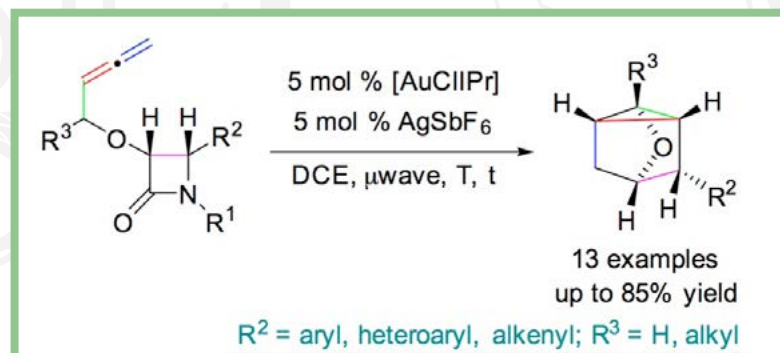
Irene Martín Mejías

Se ha abordado la utilidad sintética de diferentes alenos y alquinos funcionalizados en la preparación controlada de diversos tipos de compuestos de interés, tanto desde el punto de vista químico como biológico. Adicionalmente se plantea el desarrollo de metodología sintética basada en reacciones secuenciales y procesos tándem de funcionalización y ciclación en lactamas funcionalizadas quirales.

## HITOS DESTACADOS

### Nexo de unión entre la catálisis de oro y el síntón $\beta$ -lactámico. Síntesis de compuestos “tipo caja”.

Una investigación experimental y teórica conjunta entre científicos del IQOG-CSIC y a UCM ha dado lugar a una inesperada síntesis diastereoselectiva de compuestos tensionados “tipo caja” a partir de alenil- $\beta$ -lactamas diferentemente sustituidas utilizando catálisis de oro. El proceso implica la ruptura simultánea de los enlaces N1–C4 y C2–C3 del anillo  $\beta$ -lactámico y la formación simultánea de varios enlaces carbono-carbono. Este trabajo se ha publicado como comunicación preliminar en “Stereoselective Synthesis of Strained Cage Compounds via Gold-Catalyzed Allene Functionalization” \*Alcaide, B.; \*Almendros, P.; Cembellín, S.; Fernández, I.; Martínez del Campo, T. Chem. Commun. **2016**, 52, 10265-10268; DOI: 10.1039/c6cc03779h.

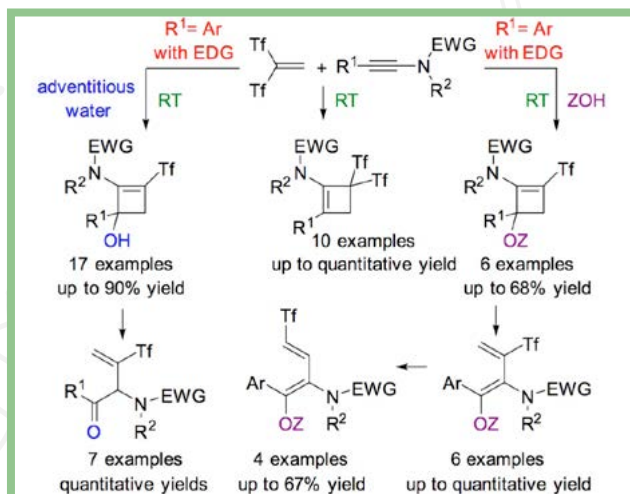


Síntesis diastereoselectiva de compuestos tensionados “tipo caja” catalizada por Au(I)

### Síntesis de ciclobutenos funcionalizados a temperatura ambiente sin el uso de metales.

En el último año, investigadores del IQOG-CSIC y de la Unidad Asociada de Lactamas y Heterociclos Bioactivos de la UCM han estudiado la reacción de la especie altamente electrófila  $\text{Tf}_2\text{C}=\text{CH}_2$  con ynamidas para dar lugar a ciclobuteno-triflonas altamente funcionalizadas; constituyendo un raro ejemplo de ciclación [2+2] en condiciones suaves de reacción sin el uso de metales. La utilidad sintética de estos carbociclos tensionados también se ha puesto de

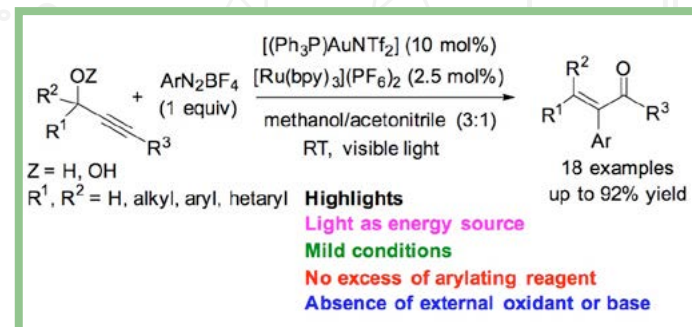
manifiesto. Estos resultados se han publicado como artículo en “Direct Metal-Free Entry to Aminocyclobutenes or Aminocyclobutenols from Ynamides. Synthetic Applications” \*Alcaide, B.; \*Almendros, P.; Lázaro-Milla, C. Chem. Eur. J. **2016**, 22, 8998-9005; DOI: 10.1002/chem.20160104 (seleccionado como Hot Paper).



Estudio de la ciclación [2+2] de ynamidas con Tf<sub>2</sub>C=CH<sub>2</sub> para la preparación selectiva de ciclobutenos y su utilidad sintética

### Arlación de alcoholes propargílicos catalizada por complejos de oro e inducida por luz visible.

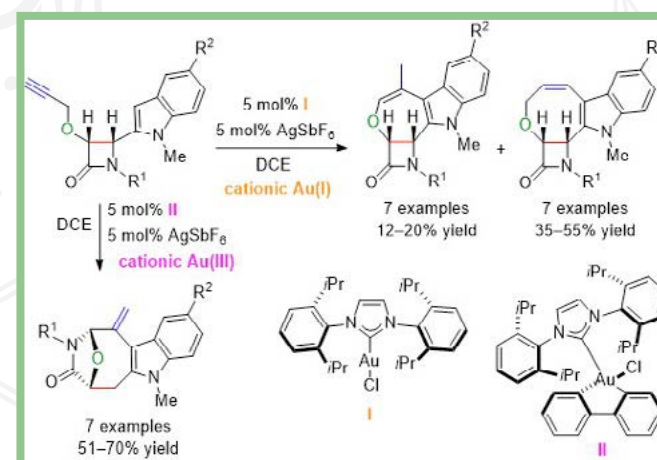
Este logro se ha conseguido gracias a una investigación conjunta entre científicos del IQOG-CSIC y de la UCM. Se ha estudiado el acoplamiento arilante de alquinoles y sales de diazonio en presencia de luz y sales de Au(I). Tanto el exceso de oxidantes o bases como el uso de altas temperaturas, requeridos por secuencias similares descritas anteriormente, se eliminan en nuestro proceso fotoquímico. Este trabajo se ha publicado en “Domino Meyer–Schuster/Arylation Reaction of Alkynols or Alkynyl Hydroperoxides with Diazonium Salts Promoted by Visible Light under Dual Gold and Ruthenium Catalysis” \*Alcaide, B.; \*Almendros, P.; Busto, E.; Luna, A. Adv. Synth. Catal. **2016**, 358, 1526-1533; DOI: 10.1002/adsc.201600158 (número especial titulado “Gold Catalysis: Quo Vadis?” editado por Antonio M. Echavarren, A. Stephen K. Hashmi y Dean F. Toste).



Síntesis fotoquímica de cetonas  $\alpha,\beta$ -insaturadas catalizada por oro.

### Catálisis de oro: Control de la reactividad ejercido por el estado de oxidación del metal.

Utilizando como elemento de control el estado de oxidación del catalizador de oro [(III) vs (I)], se ha logrado una reactividad divergente en alquini-lactamas. Este trabajo de investigación experimental y teórica conjunta entre científicos del IQOG-CSIC y la UCM se ha publicado como comunicación preliminar en “Cationic Au(III) versus Au(I): Catalyst-Controlled Divergent Reactivity of Alkyne-Tethered Lactams” \*Alcaide, B.; \*Almendros, P.; Cembellín, S.; Fernández, I.; Martínez del Campo, T. Chem. Eur. J. **2017**, 23, 3012-3015; DOI: 10.1002/chem.201700234.

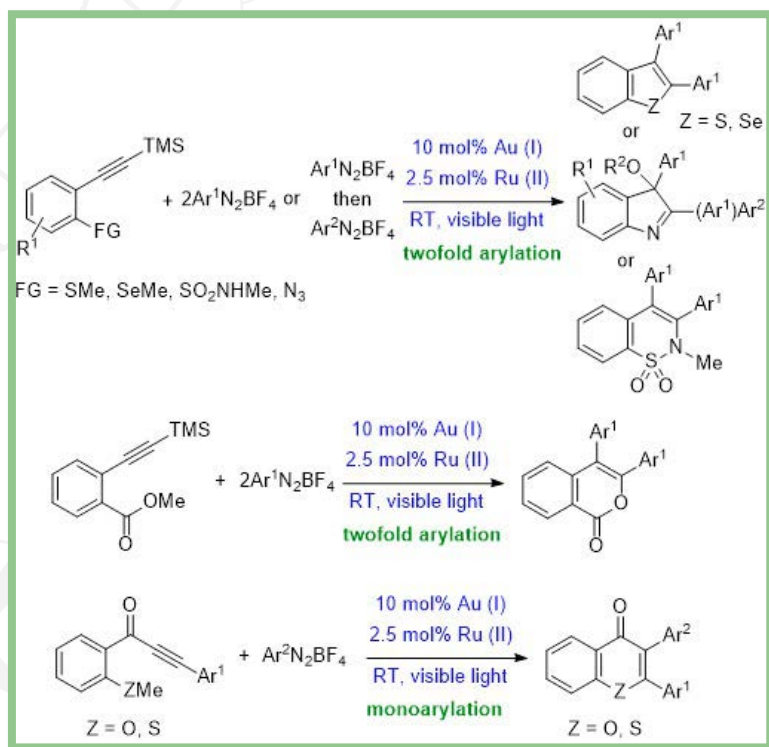


Reactividad controlada por el estado de oxidación del catalizador de oro



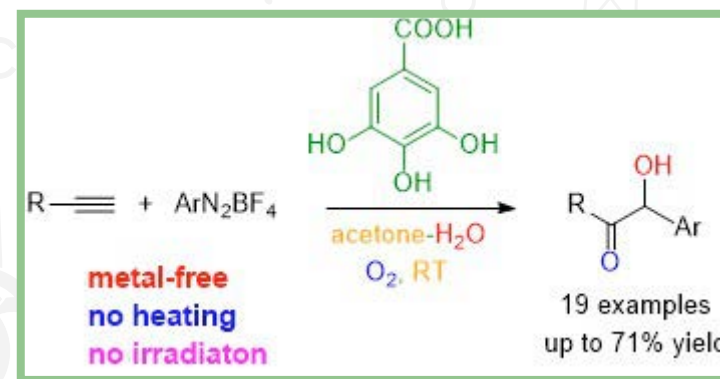
### Síntesis de heterociclos catalizada por oro e inducida por luz visible.

Una catálisis cooperativa sal de oro/catalizador foto-redox ha permitido el uso de sales de diazonio como reactivos de arilación en la síntesis de heterociclos benzo-fusionados promovida por luz visible. Este trabajo se ha publicado como artículo en "Photopromoted Entry to Benzothiophenes, Benzoselenophenes, 3H-Indoles, Isocoumarins, Benzosultams, and (Thio)Flavones by Gold-Catalyzed Arylative Heterocyclization of Alkynes" \*Alcaide, B.; \*Almendros, P.; Busto, E.; Herrera, F.; Lázaro-Milla, C.; Luna, A. *Adv. Synth. Catal.* **2017**, 359, 2640-2652; DOI: 10.1002/adsc.201700427.



### Síntesis verde de benzoinas desde alquinos.

Como alternativa conveniente a la condensación benzoinica cruzada, se ha descrito la preparación directa de  $\alpha$ -hidroxi-cetonas desde alquinos terminales en condiciones de oxidación aeróbica usando sales de diazonio como la fuente de areno y una molécula orgánica como catalizador. Este trabajo se ha publicado como comunicación preliminar en "De Novo Synthesis of  $\alpha$ -Hydroxy Ketones via Gallic Acid-Promoted Aerobic Coupling of Terminal Alkynes with Diazonium Salts" \*Alcaide, B.; \*Almendros, P.; Fernández, I.; Herrera, F.; Luna, A. *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 17227-17230; DOI: 10.1002/chem.201705106.

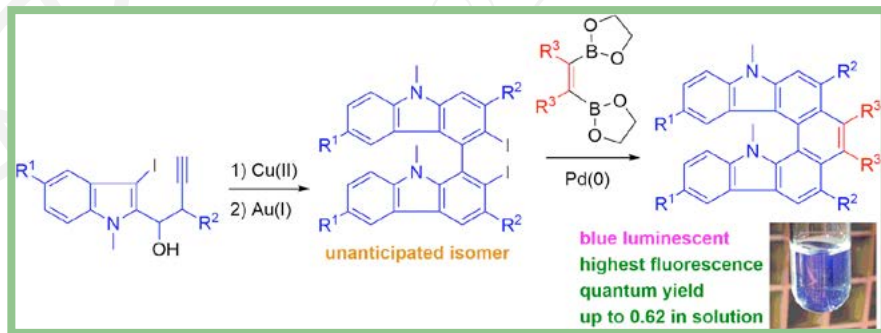


### A Facile Synthesis of Blue Luminescent [7]Helicenocarbazoles Based on Gold-Catalyzed Rearrangement-Iodonium Migration and Suzuki-Miyaura Benzannulation Reactions.

B. Alcaide, P. Almendros, C. Aragoncillo, E. Busto, López- C. G. Calixto, M. Liras, V. A. de la Peña O'Shea, A. García-Sánchez, H. V. Stone. *Chem. Eur. J.* **2018**, 24, 7620-7625; DOI: 10.1002/chem.201801179 (seleccionado como Hot Paper).

Se han preparado nuevos azahelicenos que presentan interesantes propiedades fotofísicas en una secuencia sintética de cuatro etapas catalizadas por metales. Estos [7]helicenocarbazoles son luminóforos azules muy eficientes.

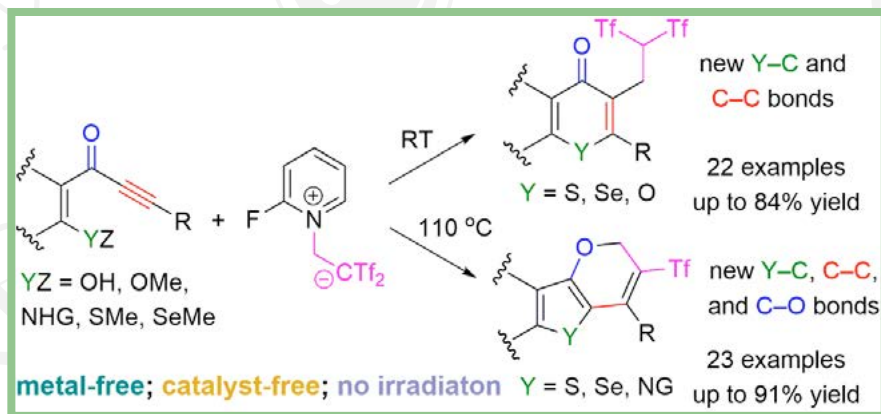




Síntesis de [7]helicenocarbazoles luminiscentes

### Divergence in Ynone Reactivity: Atypical Cyclization by 3,4-Difunctionalization versus Rare Bis(cyclization).

Alcaide, B.; Almendros, P.; Lázaro-Milla, C.; Delgado-Martínez, P. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 8186-8194; DOI: 10.1002/chem.201800630. La reacción de ciclación de diferentes ynonas con  $\text{Tf}_2\text{C}=\text{CH}_2$ , generado in situ, ha dado lugar a una preparación divergente de dos tipos de triflonas, bien a heterociclos de seis eslabones o a heterociclos fusionados de cinco eslabones.

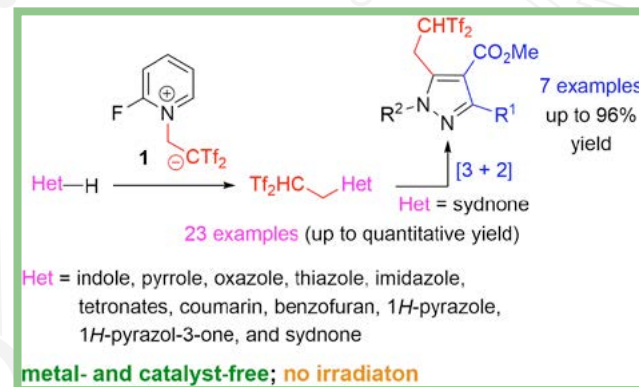


Síntesis de bis(triflil)flavonas, bis(triflil)tioflavonas, bis(triflil)selenoflavonas, (triflil)benzotienopiranos, (triflil)benzoselenofenopiranos, (triflil)vinil auronas, y (triflil)piranoindoles

### Transition Metal-Free Controlled Synthesis of Bis[(Trifluoromethyl)Sulfonyl] Ethyl-Decorated Heterocycles.

P. Almendros, H. Yanai, S. Hoshikawa, C. Aragoncillo, C. Lázaro-Milla, M. Toledano-Pinedo, S. Takahashi, B. Alcaide. *Org. Chem. Front.* **2018**, *5*, 3163-3169; DOI: 10.1039/c8qo00955d.

Varios heterociclos han reaccionado con una sal de 2-fluoropiridinio para dar lugar de forma controlada a aductos fluorados a través de una reacción de bis[(trifluorometil)sulfonyl]etilación. De particular interés ha sido la modificación estructural de varios medicamentos comerciales como Phenazone y Edaravone.



Síntesis directa de heterociclos funcionalizados con un grupo bis[(trifluorometil)sulfonyl]

## PUBLICACIONES DESTACADAS

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; Aragoncillo, C.; Fernández, I.; Gómez-Campillos, G.

Título: Metal-Free Allene-Based Synthesis of Enantiopure Fused Polycyclic Sultones.

Revista: *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 285-294; DOI: 10.1002/chem.201504045.

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; Martín-Montero, R.; Ruiz, M. P.

Título: Allene-Based Gold-Catalyzed Stereodivergent Synthesis of Azapolycyclic Derivatives of Unusual Structure.

Revista: Adv. Synth. Catal. **2016**, 358, 1469-1477; DOI: 10.1002/adsc.201501145 (número especial titulado "Gold Catalysis: Quo Vadis?" editado por Antonio M. Echavarren, A. Stephen K. Hashmi y Dean F. Toste).

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; González, A. M.; Luna, A.; Martínez-Ramírez, S.

Título: Palladium Nanoparticles in Water: A Reusable Catalytic System for the Cycloetherification or Benzannulation of  $\alpha$ -Allenols

Revista: Adv. Synth. Catal. **2016**, 358, 2000-2006; DOI: 10.1002/adsc.201501132.

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; Cembellín, S.; Martínez del Campo, T.; Muñoz, A.

Iron-Catalyzed Domino Indole Fluorination/Allenic Aza-Claisen Rearrangement.

Revista: Chem. Commun. **2016**, 52, 6813-6816; DOI: 10.1039/c6cc02012g.

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; Busto, E.; Lázaro-Milla, C.

Título: Photoinduced Gold-Catalyzed Domino C(sp) Arylation/Oxyarylation of TMS-Terminated Alkynols with Arenediazonium Salts.

Revista: J. Org. Chem. **2017**, 82, 2177-2186; DOI: 10.1021/acs.joc.6b03006.

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; Lázaro-Milla, C.

Título: Regioselective Synthesis of Heteroatom-Functionalized Cyclobutene-Triflones and Cyclobutenones.

Revista: Adv. Synth. Catal. **2017**, 359, 2630-2639; DOI: 10.1002/adsc.201700492.

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; Aparicio, B.; Lázaro-Milla, C.; Luna, A.; Nieto Faza, O.

Título: Gold-Photoredox Cocatalyzed Tandem Oxycyclization/Coupling Sequence of Allenols and Diazonium Salts with Visible Light Mediation.

Revista: Adv. Synth. Catal. **2017**, 359, 2789-2800; DOI: 10.1002/adsc.201700598.

Autores (p.o. de firma): Alcaide, B.; Almendros, P.; Cembellín, S.; Martínez del Campo, T.; Palop, G.

Título: Allenols versus Allenones: Rhodium-Catalyzed Regiodivergent and Tunable Allene Reactivity with Triazoles.

Revista: Chem. Eur. J. **2017**, 23, 13754-13759; DOI: 10.1002/chem.201702468.

## **PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS (conferencias invitadas, plenarias, etc.)**

**Eco-friendly Cyclization Reaction of Allenols Catalyzed by Palladium Nanoparticles (PdNPs) in Water.** Alcaide, B.; Almendros, P.; González, A. M.; Luna, A. Congreso Internacional: CAFC-11 (11<sup>th</sup> International Congress on Catalysis and Fine Chemicals). Comunicación oral. Lyon (Francia). 2016.

**New catalytic process using palladium nanoparticles for the construction of potentially bioactive heterocycles.** Alcaide, B.; Almendros, P.; Luna, A. Congreso Internacional: 14th International Conference on Nanomaterials and Nanotechnology. Comunicación oral. Madrid (España). 2017.

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

### **Síntesis De Compuestos De Alto Valor Añadido Mediante Procesos Eficientes De (Carbo) Heterociclación En Alenos Funcionalizados.**

Entidad Financiadora: MINECO, Ref. CTQ2012-33664-C02-02.

Duración: enero 2013 - diciembre 2016.

Investigador principal: Pedro Almendros Requena.

Financiación total: 46.800€.

### **Procesos catalíticos de ciclación y/o reagrupamiento en alenos y alquinos. Aplicación a la síntesis eficiente de productos de alto valor añadido.**

Entidad financiadora: MINECO, Ref. Ctq2015-65060-C2-2-P.

Duración: enero 2016 - diciembre 2018.

Investigador principal: Pedro Almendros Requena.

Financiación total: 55.660€.

Nuestro grupo mantiene una estrecha colaboración con varios investigadores del Departamento de Química Orgánica I de la Universidad Complutense de Madrid (UCM) a través de la **Unidad Asociada al CSIC** "Lactamas y Heterociclos Bioactivos".

## TESIS DOCTORALES

### **Nuevos Métodos Catalíticos de Ciclación/Transposición de Alenos Basados en Metales de Transición.**

Sara Cembellín Santos.

Complutense de Madrid. Facultad de Química. 2017

Calificación: Sobresaliente "*cum laude*".

## MÁSTERES DE INVESTIGACIÓN

### **Nuevas Metodologías Sintéticas Basadas en Alenos, Alquinos y Heterociclos Bioactivos**

Miriam Seves del Cerro.

Complutense de Madrid. Facultad de Química. 2016.

Calificación: Sobresaliente.

### **Alenos y Heterociclos Bioactivos: Aplicaciones Sintéticas.**

Fernando Herrera García.

Complutense de Madrid. Facultad de Química. 2016.

Calificación: Sobresaliente.

### **Nuevas Estrategias Sintéticas Basadas en Heterociclos Bioactivos y Sistemas Insaturados.**

Mireia Toledano Pinedo.

Complutense de Madrid. Facultad de Química. 2017.

Calificación: Sobresaliente.

### **Nuevas Metodologías Sintéticas Basadas en Alenos, Alquinos y Heterociclos Bioactivos.**

Imanol Burgos Redondo.

Complutense de Madrid. Facultad de Química. 2017.

Calificación: Sobresaliente.

### **Nuevas Estrategias Sintéticas Basadas en Alenos y Heterociclos Bioactivos.**

Borja Aparicio Gil.

Complutense de Madrid. Facultad de Química. 2017.

Calificación: Sobresaliente.

### **Nuevas Metodologías Sintéticas Basadas en Alenos, Alquinos y Heterociclos Bioactivos.**

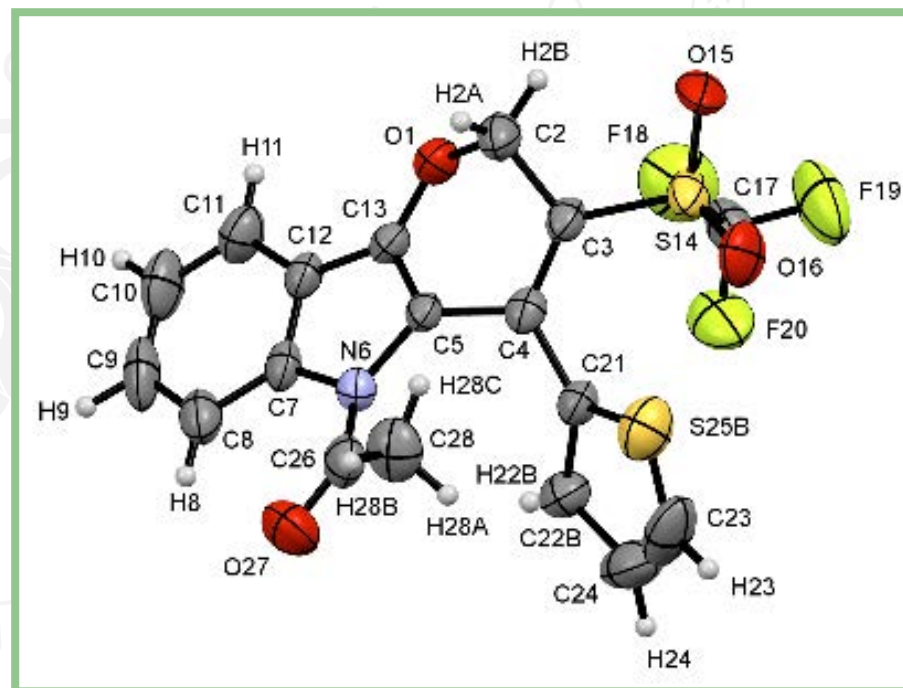
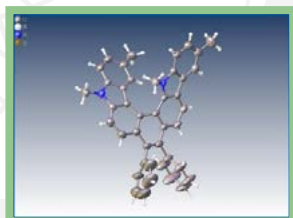
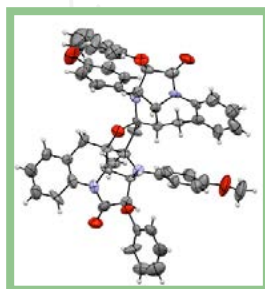
Guillermo Pedro Palop Clares.

Complutense de Madrid. Facultad de Química. 2017.

Calificación: Sobresaliente.

## PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

Candidatura española seleccionada para participar en la 67ª Reunión Lindau de Premios Nobel (Química) que se celebró en Lindau (Alemania) del 25 al 30 de junio de 2017, a la solicitud presentada por la Dra. Sara Cembellín Santos (perteneciente a la Unidad Asociada al CSIC "Grupo de Lactamas y Heterociclos Bioactivos" y cuyo Director de Tesis fue el Dr. Pedro Almendros).







## Personal

### Investigadores en plantilla

**Bernardo Herradón García**

Nuestros temas de más recientes abarcan un amplio rango de la química, incluyendo la síntesis orgánica, compuestos bioactivos, estructura e interacciones de compuestos aromáticos y péptidos, toxicología computacional, materiales nanoestructurados (preparación, caracterización y propiedades), diseño y preparación de líquidos iónicos para electrolitos de baterías y condensadores, y materiales composites derivados de grafeno.

### HITOS DESTACADOS

Una de las patentes de nuestro grupo —describiendo la obtención de materiales composites de grafeno y solicitada en 2014— ha sido extendida a Europa, Estados Unidos y 10 países más y ha dado lugar a la creación de la empresa (Gnanomat) en 2014, de la que soy socio fundador. En sus comienzos, la empresa obtuvo numerosos reconocimientos y galardones, la mayoría de carácter honorífico. A partir de junio de 2016, Gnanomat consiguió importante

## Departamento de Síntesis, Estructura y Propiedades de los Compuestos Orgánicos (SEPCO)

### Grupo de Péptidos y Compuestos Aromáticos (PEPARO)

financiación en proyectos NEOTEC del CDTI (MINECO), en el Foro de Emprendedores de la Fundación REPSOL y tres proyectos europeos para pequeñas y medianas empresas de base tecnológica (SME Instruments) dotadas, en su conjunto, con más de 2 millones de euros de subvención. El 24 de septiembre de 2018, el 55,2% de Gnanomat fue adquirida por la empresa británica Versarien, una compañía dedicada al desarrollo de materiales para aplicaciones tecnológicas.

### PUBLICACIONES DESTACADAS

J. F. Vélez, M. B. Vazquez-Santos, J. M. Amarilla, P. Tartaj, B. Herradón, E. Mann, C. del Río, E. Morales. Asymmetrical imidazolium-trialkylammonium room temperature dicationic ionic liquid electrolytes for Li-ion batteries. *Electrochimica Acta* 2018, 280, 171-180.

B. Herradón. Química y biomedicina. Búsqueda de inhibidores de calpaína, una proteasa con múltiples actividades. *Acta Científica y Tecnológica* 2018, 9-17.

La química orgánica en la JAE y en los primeros años del CSIC: de Rodríguez Carracido a Lora Tamayo. Bernardo Herradón García en Ciencia y Técnica en la Universidad. *Trabajos de Historia de las Ciencias y de las Técnicas*. Volumen I, 199-211. Dolores Ruiz-Berdún (editora). Universidad de Alcalá, servicio de publicaciones. 2018, ISBN: 978-84-16978-80-9.

J.F. Vélez, L.V. Álvarez, C. del Río, B. Herradón, E. Mann, E. Morales. Imidazolium-based Mono and Dicationic Ionic Liquid Sodium Polymer Gel Electrolytes. *Electrochimica Acta* 2017, 241, 517–525.

I. de Miguel, E. Morales, B. Herradón, C. del Río, E. Mann. Synthesis and characterization of oligo(oxyethylene)-functionalized thiazolium based room temperature ionic liquids. *Tetrahedron Letters* 2016, 57, 3291-3293.

I de Miguel, M. Velado, B. Herradón, E. Mann. Synthetic studies on the application of the intramolecular azide-alkene 1,3-dipolar cycloaddition reaction in the construction of the core structure of complex alkaloids. *Tetrahedron* 2016, 72, 4617-4625.

Rearrangements in carbohydrate templates to the way to peptide-scaffold hybrids and functionalized heterocycles. B. Herradón, I. de Miguel, E. Mann. En *Domino and Intramolecular Rearrangement Reactions as Advanced Synthetic Methods in Glycoscience* (editors: Zbigniew J. Witczak y Roman Bielski) 2016, 279-296 (ISBN: 9781119044208).

## **PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS (conferencias invitadas, plenarias, etc.)**

En el periodo 2016-8, ha impartido dos conferencias invitadas y ha sido moderador de una sesión científica en dos congresos: XIII Congreso de la SEHCYT y XXXVI Reunión Bial de la Real Sociedad Española de Química.

Coautor de seis comunicaciones científicas —en formato cartel— en tres congresos internacionales sobre baterías y dispositivos electroquímicos de almacenamiento de energía.

## **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN**

**Electrolitos de líquidos iónicos y electrodos basados en coloides porosos como combinaciones avanzadas para baterías seguros con amplio rango de temperatura de trabajo.**  
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación; referencia: MAT2014-54994-R.

Duración: Desde enero de 2015 hasta junio de 2018.

Investigador principal: Dr. Enrique Morales.

Financiación: 217.800 €.

## **PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS**

Placa de Honor de la Asociación Española de Científicos (AEC) en 2016.

Insignia de oro y brillante de la Asociación de Químicos de Madrid (AQM) en 2016.

## **DIVULGACIÓN CIENTÍFICA**

### **Artículos sobre divulgación científica, política científica e historia de la ciencia**

En el periodo 2016-8, Bernardo Herradón es el autor de 13 artículos sobre estas temáticas en revistas en papel. Los más recientes se indican a continuación:

- La madre del álgebra moderno. *Principia* 2018, temporada 4, episodio 2.

- Efemérides químicas de 2018. 100cias@uned. Revista de la Facultad de Ciencias de la UNED 2018, #11.
- Química y biomedicina. Búsqueda de inhibidores de calpaína, una proteasa con múltiples actividades. Acta Ciencia y Tecnología 2018 #28, 9-17.
- Semblanza de Manuel Seara Valero, galardonado con la Placa de Honor de la Asociación Española de Científicos. Acta Ciencia y Tecnología 2018 #28, 34-35.
- Una fantasía sobre Conversaciones de Química. Principia 2018, temporada 3, episodio 7.
- La química y el cine: las enseñanzas de Breaking Bad. Enlace, 2018, #42, 16-17.

### Ponencias en cursos de verano

En el periodo 2016-8, ha sido ponente en nueve sesiones de seis cursos de verano. A continuación, se indican los del año 2018, ambas celebradas en VII Escuela de verano sobre historia de la química. Las Sociedades Químicas en el centenario de la Fundación de la IUPAC y el año internacional de la Tabla Periódica (Universidad de La Rioja). Logroño, 12 de julio de 2018.

- Conmemoraciones químicas en 2018. Ponencia en la mesa redonda Las efemérides químicas en 2018-9.
- Las dos caras de la Ciencia. Centenario del Premio Nobel a Fritz Haber. Bernardo Herradón.

### Ponencias en otros cursos

Bernardo Herradón ha sido ponente en 27 sesiones en 10 cursos. La mayoría de los cursos han sido de formación de docentes preuniversitarios. A continuación, se detallan las conferencias en el curso CTIF-Este de formación de profesorado **Nuevas herramientas didácticas para la enseñanza de la química**, celebradas en el año 2018:

- Química y cine. Coslada (Madrid), 4 de diciembre de 2018.
- Química y medioambiente. Coslada (Madrid), 4 de diciembre de 2018.
- La historia de la química como herramienta didáctica. Coslada (Madrid), 15 de noviembre de 2018.
- Química y sociedad. Coslada (Madrid), 13 de noviembre de 2018.
- La industria farmacéutica. Controversias en biología y biomedicina con repercusión social. Alcalá de Henares (Madrid), 1 de marzo de 2018.
- Química y cine. Alcalá de Henares (Madrid), 5 de febrero de 2018.
- Química y ordenadores. Alcalá de Henares (Madrid), 31 de enero de 2018.
- La historia de la ciencia (y la biografía de los científicos) como herramienta didáctica. Alcalá de Henares (Madrid), 17 y 22 de enero de 2018.
- Los avances de la química y su impacto en la sociedad. Alcalá de Henares (Madrid), 15 y 17 de enero de 2018.

## **Dirección del curso *Los avances de la química y su impacto en la sociedad***

Bernardo Herradón es el director de este curso. En el periodo 2016-8 se celebraron las dos últimas ediciones del curso: 2016 (final de la quinta edición) y 2018 (sexta edición).

Disponemos de un canal de YouTube (<https://www.youtube.com/channel/UCCzusoEkQi2TbxBw8tPKGDg/videos>) donde colgamos los videos de las sesiones (hasta ahora 33 videos). Los videos disponibles hasta este momento han sido vistos más de 13.600 veces en el canal de YouTube, pero también se pueden visionar en la web del curso (<https://educacionquimica.wordpress.com/>) que es la mejor vía para su difusión, pues esta web tuvo casi 600.000 visitas en 2018, con un aumento de alrededor del 20% anualmente. Hay que destacar que la web es muy popular en Latinoamérica, especialmente en México (el país hispanoparlante más poblado con una importante industria e investigación en química).

También hay que mencionar que la asistencia al curso sirve para que los profesores de secundaria puedan tener créditos académicos de la Comunidad de Madrid (a través de un acuerdo con la Asociación de Químicos de Madrid).

## **Conferencias y ponencias de difusión de la cultura científica, política científica e historia de la ciencia**

Ponente en 56 conferencias —la mayoría en centros educativos—. Las del año 2018 se indican a continuación.

- Los elementos químicos en nuestra vida cotidiana. 2019: Año Internacional de la Tabla Periódica. Conferencia en el CAUM, Madrid.
- Enseñar y aprender química con el cine. Conferencia en la Casa de la Ciencia. Valencia.

- Papel de las sociedades científicas, los museos y la divulgación en la formación de la ciudadanía. Universidad de Valencia, Burjassot.
- Descubrimiento de fármacos: aspectos sociales e históricos. Conferencia inaugural en el Máster Interuniversitario 'Descubrimiento de fármacos' (UCM, UAH, USP-CEU). Facultad de Farmacia, UCM.
- La química y el deporte. Conferencia en el IES Doctor Sancho de Matienzo. Villasana de Mena (Burgos).
- Ciencia, arte, humanidades: ¡una única cultura! Conferencia en el IES Doctor Sancho de Matienzo. Villasana de Mena (Burgos).
- La química cotidiana: cosmética, polímeros y medio ambiente. Bernardo Herradón. Conferencia en la Universidad de Alicante. San Vicente de Raspeig (Alicante).
- Los hitos de la historia de la química y su impacto en la sociedad. Bernardo Herradón. Conferencia en el Ateneo de Madrid.
- Del benceno al grafeno: de la investigación académica a la creación de empresas. Conferencia en la UNED, Madrid, 10 de mayo de 2018.
- La química de nuestras aficiones. Bernardo Herradón. Conferencia en el III Congreso Científicate, MUNCYT, Alcobendas (Madrid).
- La ciencia republicana. Conferencia en la XVI Jornadas de la Cultura de la República, 9-11 de abril de 2018, Universidad Autónoma de Madrid.
- ¿Qué es la química? ¿Qué hace un químico? La importancia de la cultura científica. Bernardo Herradón. Conferencia en el CENQUIOR-CSIC dentro de las jornadas 4º ESO+EMPRESA 2018.
- La química de las cosas que nos gustan. Conferencia en el IES Emperatriz María de Austria, Madrid.



- Fármacos: aspectos históricos y sociales. Conferencia en el Instituto/Fundación Teófilo Hernando, UAM, Madrid.
- ¿Un futuro para la ciencia? Bernardo Herradón. Conferencia en la VI edición del curso de divulgación Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad. Madrid.
- Mujeres y química (algunas figuras relevantes). Conferencia en el Colegio San Ramón y San Antonio en la Semana de la Mujer y la Niña en la Ciencia. Madrid.
- La enseñanza y la divulgación de la química en el cine. Conferencia en la Universidad de Alcalá. Alcalá de Henares (Madrid).

### Sitios de internet

Página web y blog (<https://educacionquimica.wordpress.com/>) con información sobre el curso de divulgación 'Los avances de la química y su impacto en la sociedad' y material educativo, información sobre avances científicos e historia de la ciencia.

Administrador de un canal de YouTube (Avances-Química Sociedad) y de varios grupos y páginas de Facebook y Twitter. Enlaces:

YouTube:

<https://www.youtube.com/channel/UCCzusoEkQi2TbxBw8tPKGDg/videos>

Twitter (@quimicaSociedad):

<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

Página de Facebook (Todo es Química-2012):

<https://www.facebook.com/todoesquimica2012/>

Grupo de Facebook (Química):

<https://www.facebook.com/groups/AvancesQuimica/>

Grupo de Facebook (Enseñanza, Historia, Filosofía y Divulgación de la Ciencia):

<https://www.facebook.com/groups/ehfdquimica/>

### Efemérides científicas, biografías de científicos e historia de la ciencia (artículos en internet)

Bernardo Herradón frecuentemente publica breves posts recordando efemérides científicas en las diversas páginas y grupos de Facebook que gestiona. Algunos artículos más elaborados se publican en las webs Los avances de la química (ver menú lateral de <https://educacionquimica.wordpress.com/>) y de Principia (<http://principia.io/efemerides/>).

Para esta última web he escrito alrededor de 70 efemérides (entre 2016 y 2018). En la web de Los avances de la química se han publicado o enlazado alrededor de 200 artículos sobre historia de la ciencia.

### Participación en programas de radio y televisión

Bernardo Herradón es colaborador habitual en el programa A Hombros de Gigantes de RNE, en la que desde 2011 he mantenido secciones fijas. Entre 2016 y 2018 ha hablado sobre Grandes libros de ciencia (en total unos 30 programas sobre esta temática entre 2016 y 2018).

Algunos enlaces y podcasts de sus intervenciones pueden consultar en la página web <https://educacionquimica.wordpress.com/>.

Aparte de las participaciones en la sección Grandes libros de ciencia, también ha intervenido en alrededor de 25 programas de radio y televisión entre 2016 y 2018.

### Colaboraciones en artículos y reportajes en prensa

Ha participado o se le ha consultado para elaborar alrededor de 10 reportajes en prensa (papel e internet).

## Exposiciones

Asesor científico de la exposición Ciencia de Acogida (<http://cienciadeacogida.org/es/>), que ha organizado Principia y que ha estado expuesta en CentroCentro en 2017.

## Jurado en certámenes científicos

Bernardo Herradón ha sido jurado en nueve certámenes científicos en el periodo 2016-8.

## Actividades educativas preuniversitarias

Aparte de las numerosas conferencias impartidas en centros de enseñanza, del curso de divulgación Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad, y de la organización de las Olimpiadas de Química de Madrid (mencionadas más arriba), Bernardo Herradón ha realizado algunas dos talleres dirigidas a estudiantes de todos los niveles preuniversitarios: desde infantil a bachillerato.



## Personal

### Investigadores en plantilla

Roberto Fernández de la Pradilla

Alma Viso

### Personal técnico

Marina Velado

### Postdoctorales

Mónica Álvarez

### Personal en formación

Marta García-Avello

Saúl Alberca Manzano

Isabel Valencia Nieto

Jaime Tostado Sánchez

Alexandra García Crespo

Jorge Martínez Hidalgo

Stefany Cruz Ordoñez

Sofía Martínez-Vara de Rey

## Grupo de Síntesis Asimétrica con Sulfóxidos

En nuestro grupo se investiga en distintos proyectos que procuran enlazar el desarrollo de metodología sintética (nuevas reacciones, nuevos elementos de control, etc.) con su posterior aplicación a la preparación de productos biológicamente activos y estructuralmente complejos. Nuestras contribuciones se centran en problemas fundamentales como el control de la regio-, estereo- y enantioselectividad en síntesis asimétrica utilizando auxiliares quirales de azufre, para el desarrollo de nuevos receptores y catalizadores organometálicos quirales, moléculas acíclicas y heterociclos oxigenados y nitrogenados.

### HITOS DESTACADOS

**Nuevos receptores y catalizadores organometálicos quirales que incorporan azufre.** En este período, nuestro equipo ha continuado involucrado en un proyecto conjunto con el grupo de Química Bio-Organometálica (Dra. Carmen de la Torre, IQOG y Dr. Miguel Ángel Sierra, UCM) dirigido a la síntesis de entidades moleculares quirales de naturaleza organometálica para desarrollar nuevos agentes complejantes, biomoléculas y catalizadores que incorporan grupos funcionales basados en azufre.

<http://www.biorganomet.es/>.

**Transposición sulfóxido-sulfenato.** Nuestro equipo ha realizado una extensa recopilación de la investigación desarrollada en torno a este proceso de transposición 2,3-sigmatrópica por el cual los sulfóxidos alílicos dan lugar, generalmente de modo reversible a sulfenatos alílicos que en presencia de tiófilos proporcionan los

correspondientes alcoholes alílicos. Esta revisión publicada en la revista *Chemical Reviews* 2017, 117, 14201–14243, ofrece una visión completa de este proceso y de sus aplicaciones en la síntesis de productos naturales y bioactivos.

**Transposición de Overman y cicloadición Diels-Alder sobre sulfóxidos insaturados.** Hemos desarrollado condiciones de reacción para llevar a cabo la transposición 3,3-sigmatrópica tipo Overman, obteniendo diastereoselectivamente sulfínil tricloroacetamidas con muy buenos rendimientos. Esta transposición sobre sulfóxidos bis-alílicos se dirige selectivamente al doble enlace rico en electrones y nos ha proporcionado sulfóxidos dienílicos, sobre los que transcurre la cicloadición 4+2 con N-fenilmaleimida con un estereocontrol muy elevado.

**Nuevos derivados del ácido kójico como inhibidores de la actividad de Ras.** Fruto del trabajo conjunto con el grupo de la Dra. M. L. López-Rodríguez (UCM) y con el apoyo de la empresa Exon-Hit, se ha sintetizado y estudiado una serie de éteres aromáticos derivados del ácido kójico de los cuales uno de ellos destaca por su actividad frente a determinadas células tumorales. En particular la citotoxicidad es debida a la inhibición de la actividad de Ras. La unión de este compuesto con la proteína Ras mutada se produce en el sitio de unión del GTP, y parece responsable de la modulación de la actividad de Ras y de la interferencia con su vía de señalización. El descubrimiento de este compuesto publicado en *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 1676–1685, abre camino al desarrollo de moléculas más eficaces para el tratamiento de tumores producidos por alteraciones en el funcionamiento de Ras.

## PUBLICACIONES DESTACADAS

I. Colomer, C. Gheewala, C. Simal, M. Velado, R. Fernández de la Pradilla, A. Viso. “Sulfinyl-Mediated Stereoselective Overman Rearrangements and Diels–Alder Cycloadditions” *J. Org. Chem.*, 2016, 81, 4081–4097.

M. Frutos, M. G. Avello, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, M. C. de la Torre, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. “Gold Sulfinyl Mesoionic Carbenes: Synthesis, Structure, and Catalytic Activity” *Org. Lett.*, 2016, 18, 3570–3573.

N. I. Marín-Ramos, C. Piñar, H. Vázquez-Villa, M. Martín-Fontecha, A. González, A. Canales, S. Algar, P. P. Mayo, J. Jiménez-Barbero, C. Gajate, F. Mollinedo, L. Pardo, S. Ortega-Gutiérrez, A. Viso, M. L. López-Rodríguez. “Development of a nucleotide exchange inhibitor that impairs Ras oncogenic signaling” *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 1676–1685.

M. Frutos, M. A. Ortuño, A. Lledos, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, M. C. de la Torre, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. “Desulfinylation of Ag(I) Sulfinyl Mesoionic Carbenes: Preparation of C-Unsubstituted Au(I)–1,2,3-Triazole Carbene Complexes” *Org. Lett.*, 2017, 19, 822–825.

M. Álvarez-Pérez, M. Velado, D. García-Puentes, E. Sáez, C. Vicent, R. Fernández de la Pradilla, A. Viso, M. C. de la Torre, M. A. Sierra. “Sulfur Groups Improve the Performance of Triazole- and Triazolium-Based Interaction Units in Anion Binding” *J. Org. Chem.*, 2017, 82, 3341–3346.

M. Álvarez-Pérez, M. Frutos, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, M. C. De la Torre, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. “Gold(I)-Catalyzed Cycloisomerization-Dimerization Cascade of Benzene-Tethered 1,6-Enynes” *J. Org. Chem.*, 2017, 82, 7546–7554.

M. G. Avello, M. Frutos, M. C. de la Torre, A. Viso, M. Velado, R. Fernández de la Pradilla, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. “Chiral Sulfur Functional Groups as Definers of the Chirality at the Metal in Ir- and Rh-Half Sandwich Complexes: A Combined CD/X-ray Study” *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 14523–14531.

I. Colomer, M. Velado, R. Fernández de la Pradilla, A. Viso. “From Allylic Sulfoxides to Allylic Sulfenates: Fifty Years of a Never-Ending [2,3]-Sigmatropic Rearrangement” *Chem. Rev.*, 2017, 117, 14201–14243.



## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

### **Moléculas biofuncionales moduladas por metales de transición: síntesis y aplicaciones.**

Entidad financiadora: MINECO.

ref: CTQ2016-77555-C2-2-R (20168L177).

Duración: 30/12/2016 - 29/12/2019.

Investigador responsable: María del Carmen de la Torre Egido.

### **Nuevas Entidades Moleculares y Catalizadores Basados en Complejos de Metales de Transición.**

Entidad financiadora: MINECO.

ref: CTQ2013-46459-C2-2-P.

Duración: 1/01/2014 - 30/09/2017.

Investigador responsable: María del Carmen de la Torre Egido.

## PRÁCTICAS DE FORMACIÓN PROFESIONAL

Ciclos de laboratorio de análisis y control de calidad y de técnico de laboratorio (340 horas) alumnos procedentes del IES Virgen de la Paloma.

## TRABAJOS FIN DE GRADO - PRÁCTICAS EN EMPRESA

### **Síntesis de compuestos organometálicos con grupos quirales de azufre.**

Alexandra García Crespo.

Grado en Química, Universidad Complutense de Madrid, julio 2017, Proyecto de Prácticas en Empresas (300 h). Calificación Sobresaliente.

### **Síntesis de compuestos organometálicos con grupos quirales de azufre: aplicación como catalizadores en la cicloisomerización de eninos.**

Jorge Martínez Hidalgo.

Grado en Química, Universidad Complutense de Madrid, septiembre 2017, Proyecto de Prácticas en Empresas (300 h). Calificación Sobresaliente.

### **Síntesis de bis-carbenos de iridio y rodio ciclometalados con grupos quirales de azufre.**

Stefany Cruz Ordoñez .

Grado en Química, Universidad Complutense de Madrid, septiembre 2017, Proyecto de Prácticas en Empresas (300 h). Calificación Sobresaliente.

### **Síntesis de 2-sulfinil dienos enantioméricamente puros.**

Sofía Martínez-Vara de Rey.

Grado en Química, Universidad Autónoma de Madrid, julio 2018, Proyecto de Prácticas en Empresas (147 h). Calificación Sobresaliente.

## MÁSTERES DE INVESTIGACIÓN

### **Síntesis y reactividad de triazolil sulfoximinas.**

Saúl Alberca Manzano.

Universidad Complutense de Madrid, septiembre 2017. Trabajo Fin de Máster. Calificación Sobresaliente.

### **Síntesis asimétrica de compuestos organometálicos.**

Isabel Valencia Nieto.

Universidad Complutense de Madrid, 12/07/2018. Trabajo Fin de Máster. Calificación Sobresaliente.

### **Síntesis y reactividad de compuestos basados en sulfóxidos y sulfoximinas.**

Jaime Tostado Sánchez.

Universidad Complutense de Madrid, 12/07/2018. Trabajo Fin de Máster. Calificación Sobresaliente.

## Grupo de Reconocimiento Molecular: Interacción Carbohidrato - ADN



**Personal**

### Investigadores en plantilla

Cristina Vicent Laso

### Personal en formación

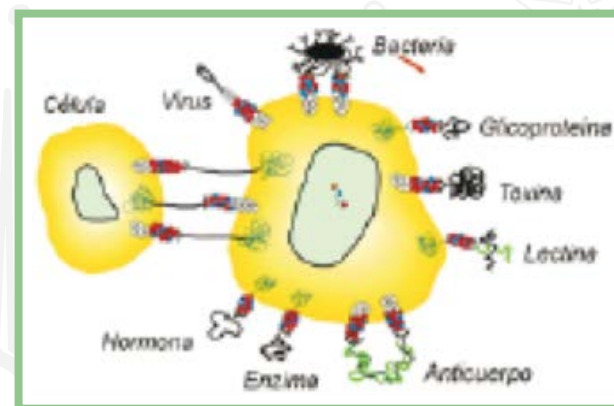
Andrea Taladríz-Sender

Diego García Puentes

Andreu Figuerola Féminas

Nuestro laboratorio centra su investigación en aspectos importantes de la Química del Reconocimiento Molecular: el estudio de las interacciones que rigen la asociación de Carbohidratos al surco menor del ADN.

En concreto, se están estudiando las interacciones de enlace de hidrógeno cooperativo y las interacciones CH- $\pi$ . El objetivo fundamental es poder aplicar esos conocimientos básicos al diseño de ligandos del ADN con mayor afinidad y selectividad.



### HITOS DESTACADOS

**Bases moleculares de la interacción Carbohidrato-ADN.** La estrategia que se ha desarrollado en nuestro grupo para poder estudiar las bases moleculares de la interacción Carbohidrato-ADN y poder aplicar dichos conocimientos al diseño de ligandos del surco menor del ADN específicos de secuencia, consiste en el diseño de una molécula que es ligando del surco menor (el vector) y a la que se le une covalentemente el carbohidrato objeto de estudio. Se pretende que el carbohidrato llegue y se aloje en el interior del surco para establecer sus interacciones con las bases del ADN.

El grupo de investigación estudia las bases moleculares de la interacción entre carbohidratos y el surco menor de ADN. Se aborda con un enfoque multidisciplinar basado en la síntesis de carbohidratos que son ligandos de ADN y estudios estructurales y termodinámicos de sus complejos con ADN por RMN, fluorescencia, CD y microcalorimetría.

A esta molécula la denominamos vector dado que permite acercar carbohidratos con distintas estructuras que se han de estudiar asociadas al surco menor del ADN.

## PUBLICACIONES DESTACADAS

M. Alvarez-Perez, M. Velado, D. Garcia-Puentes, E. Saez, C. Vicent, R. Fernández de la Pradilla, A. Viso, M.C. de la Torre, M.A. Sierra; "Sulfur Groups Improve the Performance of Triazole and Triazolium-based Interaction Units in Anion Binding" J Org Chem., **2017**, 82, 3341  
DOI: 10.1021/acs.joc.7b00261

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

**Rompiendo las fronteras del reconocimiento molecular de carbohidratos mediante RMN. Anticuerpo y ácidos nucleicos.**

**Entidad Financiadora: MINECO, CTQ2015-64597-C2-2-P.**

Duración: desde 1-1- 2015 hasta 31-12-2018.

Investigador principal: Francisco Javier Cañada Vicinay.

Cantidad concedida: 148.900 €.

Proyecto Coordinado con Jesús Jiménez-Barbero CIC Biogune.

**Multivalent Glycosystems for Nanoscience (MULTIGLYCONANO)**

Entidad Financiadora: Unión Europea, CM 1102, Programa COST.

Duración: desde 2011- 2016.

Investigador principal: Cristina Vicent.

Coordinador: B. Tumbuld, J. L. Reymond.

## TESIS DOCTORAL

**Glico-hoescht ligandos del surco menor para el estudio de la interacción carbohidrato-ADN"**

Diego García Puentes

Universidad Complutense de Madrid, fecha prevista de lectura 2019



## Grupo de Investigación del Dr. Pedro Noheda



### Personal

#### Investigadores en plantilla

Dr. Pedro Noheda Marín

#### Personal técnico

Dra. Nuria Tabarés Cantero

Ldo. David Herrero Ruíz

Durante el periodo 2016-2018, la labor investigadora del PNRG (SEPCO-IQOG) se ha focalizado en generación de nuevas teorías, modelos y metodologías formales lógicas, lingüísticas, matemáticas y computacionales con un doble objetivo: Primero, progresar tanto en el entendimiento científico de nuestra “realidad biológica-física-química” como en el de los procesos lógico-cognitivos implicados en su representación (Visualización & Imaging) formal; Segundo, mejorar los procedimientos de simulación & modelización de problemas no-resueltos (estructurales y funcionales) de reconocida complejidad computacional no-Polinómica (NP) que emergen de la sinérgica diversidad y complejidad entre sistemas organizados (lineales y no-lineales).

Su mejora siempre ha conllevado implícitamente:

1. Un progreso en el conocimiento de nuestra propia naturaleza (mecanismos de cognición, incluidos) y de la de nuestro entorno (físico y/o virtual).
2. Una mejor comunicación/transferencia de información/integración entre las actuales fronteras del estado del arte de las Ciencias sociales, de la computación (Inteligencia Artificial versus Natural o Cognitiva), de los materiales, del espacio y de la vida.

### HITOS DESTACADOS

Generación y desarrollo del Noheda-Tabarés Formal System and Language (NT-FS&L). También se han iniciado las correspondientes fases de transmisión y transferencia.

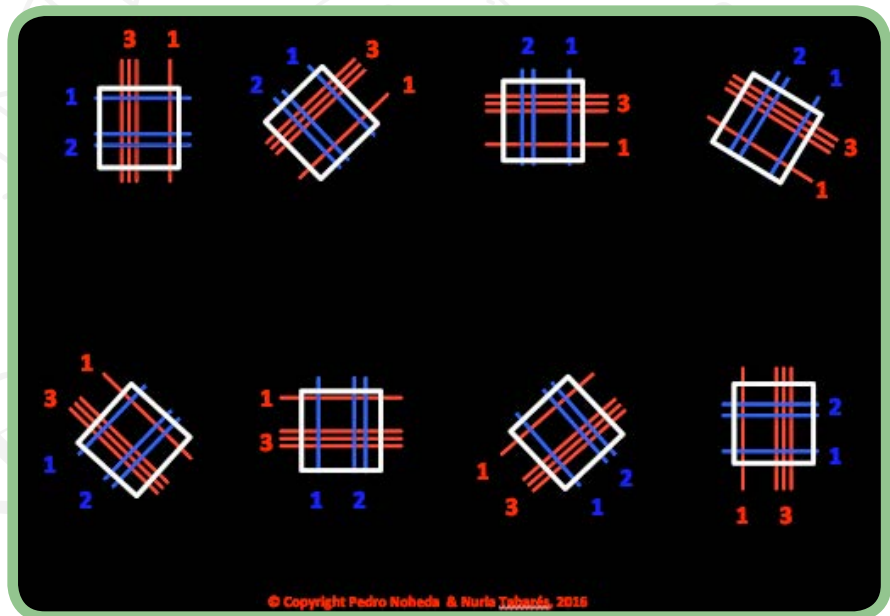
Desarrollo de Modelos basados en NT-FS&L focalizados en el cálculo, verificación, distribución y representación formal del conjunto de los NT-números naturales (especialmente, en lo referente a Paridad y Primalidad).

Desarrollo de Modelos basados en NT-FS&L focalizados tanto en el cálculo, verificación y visualización (representación formal) de la



función de partición (Teoría de Números y Estadística) del conjunto de los NT-números naturales. Aplicaciones de la NT-Teoría de la Información (especialmente, a lo referente a la Entropía).

Desarrollo de software & hardware NT-Universal Human Cognitive Computing (NT-UHCC). Se ha avanzado en sus aplicaciones en la modelización/simulación de procesos y sistemas de elevada complejidad provenientes de ciencias formales y de la computación, naturales. Por ejemplo, en Química (Estructura Formal del Sistema Periódico y del Espacio Químico), en Física (Clásica, el Problema de los n-Cuerpos; Cuántica, Estructura Formal del Modelo Standard de partículas (Ciclo CNO); Estructura de la Teorías de la Relatividad y el espacio-tiempo, y en Biología (Ciclo de Krebs; Codificación y Expresión Genética).



## PUBLICACIONES DESTACADAS

**Intellectual Creations Noheda-Tabarés (ICs NT; Deputy Vice-Presidency for Knowledge; VATC-CSIC/SPAIN)**

### Intellectual Creation NT-I (IC-NT-I)

Title (Priority Document): **THE FIRST SET OF NOHEDA-TABARÉS (NT) THEOREMS. A PRIMORDIAL, MATHEMATICAL, LOGICAL AND COMPUTABLE, DEMONSTRATION (PROOF) OF THE FAMILY OF CONJECTURES KNOWN AS GOLDBACH'S.** Authors: NOHEDA MARÍN, P.; TABARÉS CANTERO, N.

Application Number: 843

Application Date: 15/12/2016

Entity Holder: CSIC

Intellectual & Industrial Property

**Part I. "On the Noheda-Tabarés Formal System and Language (NT-FS&L)". Part II. "The first set of Noheda-Tabarés (NT) Theorems". Part III. "The first set of Noheda-Tabarés (NT-FS&L) Algorithms".**

**First Registration (VATC/CSIC) Date:** 15/12/2016; **Annex I** (nine pages document); **Annex II** (fifty two pages document).

**Second Registration (VATC/CSIC) Date:** 110/04/2017; **Annex I:** (nine pages document); **Annex II:** (fifty two pages document); **Annexed Document (NT-I):** Annex I (one hundred four pages document).

### Intellectual Creation NT-II (IC-NT-II)

Title (Priority Document): **A PRIMORDIAL, LOGICAL AND COMPUTABLE NT-FS&L STRING'S UNIVERSAL THEORY. Part. I. "On NT-S&L Formal Strings Representation and Formal Imaging"** Authors: NOHEDA MARÍN, P.; TABARÉS CANTERO, N.

Application Number: 646

Application Date: 19/12/2017

Registration Date: 19/12/2017; Entity Holder: CSIC (Intellectual & Industrial Property).

#### **Intellectual Creation NT-III (IC-NT-IV)**

Title (Priority Document): **NOHEDA-TABARÉS HUMAN COGNITIVE COMPUTATION (NT-HCC). NOHEDA-TABARÉS FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE (NT-FS&L). FORMAL (LOGIC AND COMPUTATION) REPRESENTATION AND IMAGING OF PARTITIONS (NUMBER THEORY, COMBINATORICS AND STATISTICS)**. Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N.

Application Number: 124

Application Date: 17/12/2018

Registration Date: 17/12/2018; Entity Holder: CSIC (Intellectual & Industrial Property)

#### **Intellectual Creation NT-IV (IC-NT-IV)**

Title (Priority Document): **NOHEDA-TABARÉS HUMAN COGNITIVE COMPUTATION (NT-HCC). NOHEDA-TABARÉS FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE (NT-FS&L). NT-FORMAL (LOGICS, GRAPH THEORY AND COMPUTER SCIENCE) REPRESENTATION AND IMAGING OF POINTS, LINES, SURFACES, STRINGS, BANDS, GRIDS AND NETWORKS (ADJACENCY MATRIX GROUPS)**. Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N.

Application Number: 123

Application Date: 17/12/2018

Registration Date: 17/12/2018; Entity Holder: CSIC (Intellectual & Industrial Property).

### **Noheda-Tabarés Industrial Secrets (ISs NT; Deputy Vice-Presidency for Knowledge; VATC-CSIC/SPAIN)**

#### **Industrial Secret-1 Associated with Intellectual Creation NT-I (IS-NT-1)**

Secret-(Priority Document) Attached Title: **NOHEDA-TABARÉS FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE (NT-FS&L)** (Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N. Informatics Memory Device; USB format).

Registration Number: 4576/2016; Application Date: 15/12/2016.

Notarial Registration Date: 28/12/2016; Entity Holder: CSIC.

#### **Industrial Secret-2 Associated with Intellectual Creation NT-I (IS-NT-2)**

Secret-(Priority Document Attached) Title: **THE FIRST SET OF NOHEDA-TABARÉS (NT) THEOREMS**. Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N. (Informatics Memory Device; USB format).

Application Number: 1619/2017; Application Date: 03/04/2017.

Notarial Registration Date: 04/2017; Entity Holder: CSIC.

#### **Industrial Secret-3 Associated with Intellectual Creation NT-I (IS-NT-3)**

Secret-(Priority Document Attached) Title: **THE FIRST SET OF NOHEDA-TABARÉS (NT) ALGORITHMS**. Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N. (Informatics Memory Device; USB format).

Application Number: 3185/2017; Application Date: 20/06/2017.

Notarial Registration Date: 26/04/2017; Entity Holder: CSIC

**Industrial Secret-1 Associated with Intellectual Creation NT-II (IS-NT-4)**

Secret-(Priority Document) Attached Title: **A PRIMORDIAL, LOGICAL AND COMPUTABLE NT-FS&L STRING'S UNIVERSAL THEORY. Part. I "On NT-S&L Formal Strings Representation and Formal Imaging"**. Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N. (Informatics Memory Device; USB format).

Application Number: 6806/2017; Application Date: 19/12/2017.

Notarial Registration Date: 21/12/2017; Entity Holder: CSIC.

**Industrial Secret-1 Associated with Intellectual Creation NT-III (IS-NT-5)**

Secret-(Priority Document) Attached Titled: **FORMAL (LOGIC AND COMPUTATION) REPRESENTATION AND IMAGING OF PARTITIONS (NUMBER THEORY, COMBINATORICS AND STATISTICS)**. Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N. (Informatics Memory Device; USB format).

Application Number: 7005/2018; Application Date: 21/12/2018.

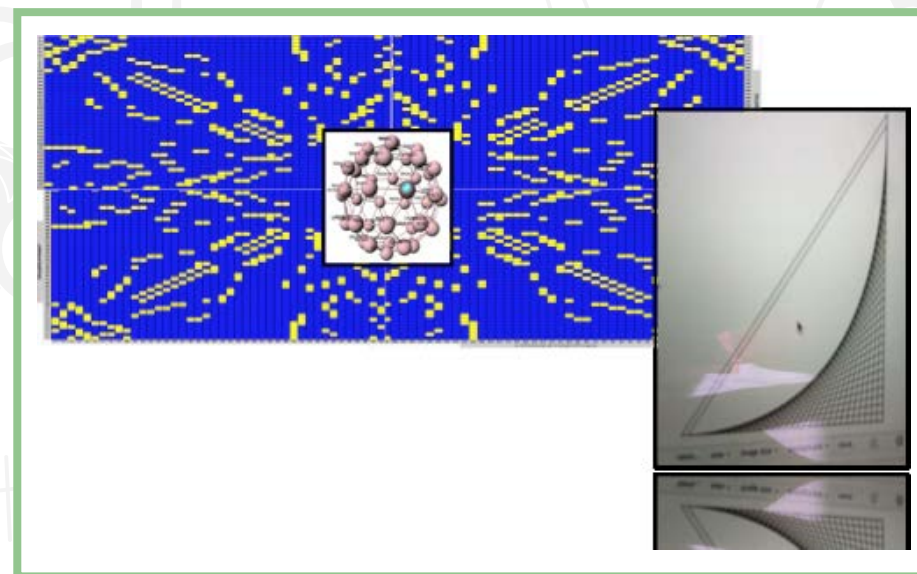
Notarial Registration: 28/12/2018; Entity Holder: CSIC.

**Industrial Secret-1 Associated with Intellectual Creation NT-IV (IS-NT-6)**

Secret-(Priority Document Attached) Titled: **NT-FORMAL (LOGICS, GRAPH THEORY AND COMPUTER SCIENCE) REPRESENTATION AND IMAGING OF POINTS, LINES, SURFACES, STRINGS, BANDS, GRIDS AND NETWORKS (ADJACENCY MATRIX GROUPS)**. Authors: Noheda Marín, P.; Tabarés Cantero, N. (Informatics Memory Device; USB format).

Application Number: 7006/2018; Application Date: 21/12/2018.

Notarial Registration Date: 28/12/2018; Entity Holder: CSIC.



## SEMINARIOS / CONFERENCIAS / PARTICIPACIÓN EN MÁSTERES UNIVERSITARIOS

**Seminario Especial:** “Una demostración primordial, matemática, lógica y computable de la familia de conjeturas conocidas como “de Goldbach””. CSIC. Centro de Química Orgánica “Lora-Tamayo”.

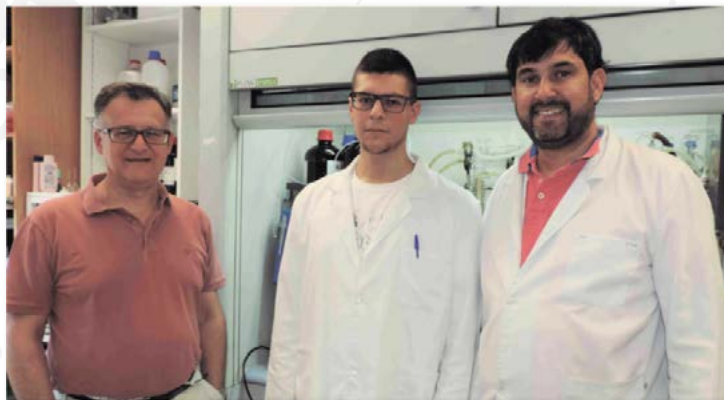
**Sesión 1:** “Una nueva firma (lógica matemática) del conjunto de los números enteros” (3 horas) 29 de Marzo de 2017.

**Sesión 2:** “Una demostración (prueba) de la familia de conjeturas conocidas como “de Goldbach” (3 horas) 31 de Marzo de 2017.

**Conferencia:** “Resolución y Verificación del Cálculo y la Distribución de todos los Números Naturales Primos”. (2 horas) 31 de Mayo de 2017. CSIC. Salón de Actos.

**Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea.** Asignatura “La Química en la Frontera de la Biología”. Curso Impartido “Sobre la Estructura Cognitiva de un Problema Biológico no Resuelto y sus Fronteras Químicas: Ubicuidad, Diversidad y Complejidad “P versus NP””. Universidad de Zaragoza (Departamento de Química Orgánica). Curso académico 2016-2017.





## Personal

### Jefe de grupo

Dr. José Luis Marco Contelles

### Personal de apoyo

Dr. Mourad Chioua

### Personal en formación

Eleonora Buzzi

Alicia Jiménez Almarza

Manuel Salgado Ramos

Alejandro Escobar Peso

Daniel Díez Iriepa

Estefanía Serrano de la Brena

Belén Meirás Sáiz

Arturo González Camuñas

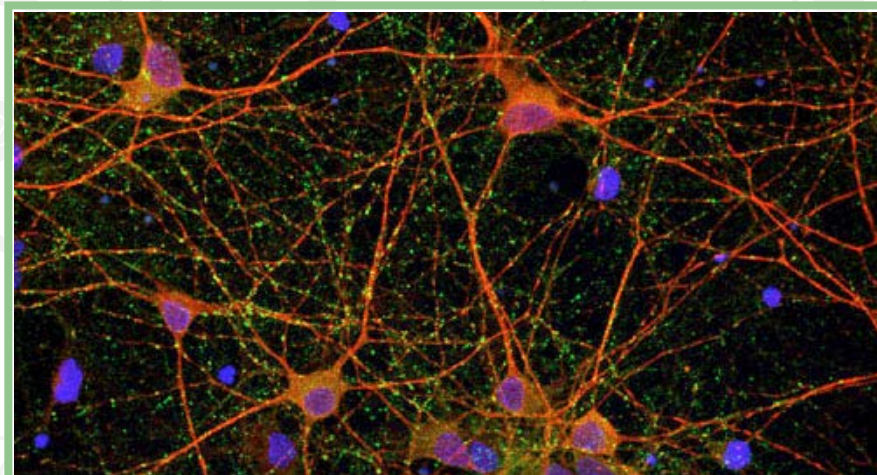
David García Vieira

## Laboratorio de Química Médica

En nuestro laboratorio desarrollamos proyectos dirigidos al diseño, síntesis y evaluación biológica de nuevas moléculas para el potencial tratamiento del ictus y la enfermedad de Alzheimer.

### HITOS DESTACADOS

#### Identificada una molécula para el potencial tratamiento del ictus



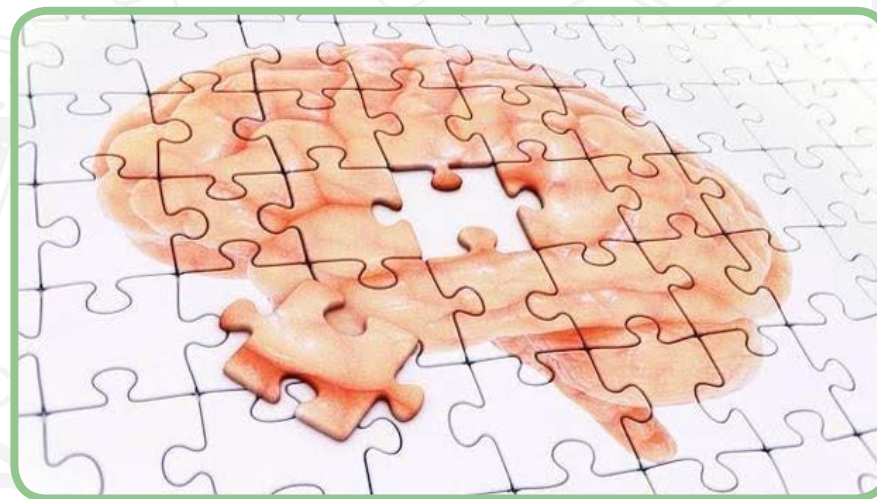
Imágenes de microscopía de cultivos de células neuronales realizados por investigadores del IBB-CSIC.

En España las enfermedades cerebrovasculares son la segunda causa de muerte, la primera en mujeres, la primera causa de discapacidad permanente y la segunda de demencia. Hay unos 120 nuevos casos por cada 100.000 habitantes al año, y más de la

mitad de los pacientes acaban incapacitados o fallecen. A pesar de su gran impacto social, no hay un tratamiento terapéutico adecuado para la mayoría de los afectados. Un equipo multidisciplinar con investigadores del Laboratorio de Química Médica del IQOG, del Hospital Ramón y Cajal de Madrid (IRYCIS), y del Instituto de Biomedicina de Sevilla (IBIS), ha identificado la molécula quinolil nitrona RP19 como un potente agente neuroprotector en modelos experimentales *in vitro* e *in vivo* de isquemia. El trabajo, publicado en la revista ACS Chemical Neuroscience, confirma el potencial terapéutico de esta molécula y abre nuevas y prometedoras perspectivas para el inicio de los estudios pre-clínicos para evaluar su potencial uso en la terapia del ictus.

En este trabajo hemos diseñado, sintetizado y evaluado en modelo animal de isquemia cerebral la quinolil nitrona RP19 como agente permeable y adecuado que mejora las propiedades farmacológicas de citicolina, o de otras nitronas como PBN o NXY-059. La nitrona RP19 se ha ensayado en tres modelos experimentales de daño isquémico: en el de privación de oxígeno-glucosa en cultivos neuronales primarios; en isquemia global transitoria, y en isquemia focal, según el modelo de la oclusión transitoria de la arteria cerebral media. De estos resultados experimentales podemos concluir que la quinolil nitrona RP19 es un potente agente neuroprotector en la isquemia experimental inducida en neuronas, y frente al daño isquémico por isquemia transitoria inducida en modelo animal, en una extensión y capacidad como no se había observado antes en otras nitronas ensayadas en modelos similares.

### Identificada una nueva molécula ‘multipotente’ para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer



Un equipo multidisciplinar europeo liderado desde el Laboratorio de Química Médica del IQOG, ha identificado la molécula MBA354 como un potente agente neuroprotector en modelos experimentales *in vitro* e *in vivo* de la enfermedad de Alzheimer. El trabajo, publicado en la revista *Angewandte Chemie, International Edition*, confirma el potencial terapéutico de esta molécula y abre nuevas y prometedoras perspectivas para el inicio de los estudios pre-clínicos para evaluar su potencial uso en la terapia de la enfermedad de Alzheimer. La enfermedad de Alzheimer es una patología neurodegenerativa y de la edad, caracterizada por una pérdida progresiva de la memoria y otros déficits cognitivos, para la que todavía no hay una terapia eficaz. Su incidencia es abrumadora, y su efecto, devastador, en todos los órdenes, ya sea individual, familiar, sanitario como socio-económico. En la búsqueda de nuevos fármacos para su tratamiento, por tratarse de una patología extremadamente compleja y multifactorial, el diseño de moléculas multipotentes, capaces de actuar simultáneamente en diversos sistemas enzimáticos o receptores implicados en el progreso y desarrollo de la enfermedad, es sin duda una de las estrategias terapéuticas preferidas, adoptada ya en numerosos laboratorios de investigación.

El estudio se ha abordado diseñando moléculas TRIpotentes, que sean capaces de inhibir las colinesterasas (enzimas que catalizan la hidrólisis del neurotransmisor acetilcolina, en la sinapsis, en colina y ácido acético), y las monoamino oxidasas A/B (enzimas que catalizan la oxidación de monoaminas y la degradación de neurotransmisores, como serotonina, noradrenalina), y que fueran antagonistas del receptor de histamina H3R, cuya regulación es bien sabido que permite la liberación de estos neurotransmisores, tanto en condiciones normales como patológicas, lo que supone que las moléculas que actúen sobre H3R pueden tener uso terapéutico en la enfermedad de Alzheimer. Esta apuesta original nos ha permitido identificar la molécula MBA354, con el perfil farmacológico *in vitro* deseado, equilibrado, con potencias de inhibición o interacción a nivel nanomolar, y como un compuesto-hit, pues, permeable a la barrera hematoencefálica, antioxidante y neuroprotector. La molécula ha mostrado un significativo efecto pro-cognitivo en un modelo *in vivo* de la enfermedad de Alzheimer, resultado que nos va a permitir ulteriores desarrollos encaminados a encontrar un compuesto-lead para su terapia.

Sobre esta investigación se ha presentado una solicitud de patente en la Oficina Española de Patentes y Marcas (Madrid), con el título “Nuevos compuestos con capacidad antioxidante que combinan la inhibición de las enzimas monoaminooxidasa y colinesterasas y la interacción con el receptor de histamina 3, su procedimiento de obtención y composiciones farmacéuticas que los contienen”, siendo los inventores José Luis Marco Contelles, Francisco López Muñoz, Holger Stark, Stefanie Hagenow, y Rona R. Ramsay, y los solicitantes el Consejo Superior de Investigaciones Científicas y la Universidad Camilo José Cela.

## PUBLICACIONES DESTACADAS

M.-Y. Wu, G. Esteban, S. Brogi, M. Shionoya, L. Wang, G. Campiani, M. Unzeta, T. Inokuchi, S. Butini and J. Marco-Contelles. Donepezil-like multifunctional agents: Design, synthesis, molecular modeling and biological evaluation. *European Journal of Medicinal Chemistry* 2016, 121, 864 – 879.

M. Criado, J. Mulet, F. Sala, S. Sala, I. Colmena, L. Gandia, O. M. Bautista-Aguilera, A. Samadi, M. Chioua, and J. Marco-Contelles. N-Benzylpiperidine derivatives as  $\alpha 7$  nicotinic receptor antagonists. *ACS Chemical Neuroscience* 2016, 7, 1157 - 1165.

M. Benchekroun, A. Romero, J. Egea, R. León, P. Michalska, I. Buendía, M. L. Jimeno, D. Jun, J. Janockova, V. Sepsova, O. Soukup, O. M. Bautista-Aguilera, B. Refouvelet. O. Ouari, J. Marco-Contelles and L. Ismaili\*. The antioxidant additive approach for Alzheimer's disease therapy: New ferulic (lipoic) acid plus melatonin modified tacrines as cholinesterases inhibitors, direct antioxidants and nuclear factor (erythroid-derived 2)-like 2 activators. *Journal of Medicinal Chemistry (Brief Article)* 2016, 59, 9967 – 9973.

M.-P. Serrano, R. Herrero-Labrador, A. Romero, A. Samadi, J. Marco-Contelles and R. Martínez-Murillo. The proof of concept of ASS234: Peripherally administered ASS234 enters the central nervous system and reduces pathology in a mouse model of Alzheimer's disease. *Journal of Psychiatry and Neuroscience* 2017, 42, 59 - 69.

Ó. M. Bautista-Aguilera, S. Hagenow, A. Palomino-Antolín, V. Farré-Alins, L. Ismaili, P.-L. Joffrin, J. S. Schwed, M. L. Jimeno, O. Soukup, J. Janockova, L. Kalinowsky, E. Proschak, I. Iriepa, I. Moraleda, A. Romero, F. López-Muñoz, M. Chioua, J. Egea, R. R. Ramsay, J. Marco-Contelles and H. Stark. Tripotent-directed indoles for Alzheimer's disease therapy combining cholinesterase and monoamine oxidase inhibition with H3R antagonism profile. *Angewandte Chemie International Edition (Hot Paper)* 2017, 56, 12765 – 12769.



M. Ayuso, E. Martínez-Alonso, M. Chioua, A. Escobar-Peso, J. Montaner, J. Marco-Contelles and A. Alcázar. Quinolinylnitrone RP19 induces neuroprotection after transient brain ischemia. ACS Chemical Neuroscience 2017, 8, 2208 - 2213.

M. Chioua, E. Buzzi, I. Moraleda, I. Iriepa, M. Maj, A. Wnorowski, C. Giovannini, A. Tramarin, F. Portali, L. Ismaili, P. López-Alvarado, M. L. Bolognesi, K. Jozwiak, J. C. Menéndez, J. Marco-Contelles and M. Bartolini. Tacripyrimidines, the first tacrine-dihydropyrimidine hybrids, as multi-target-directed ligands for Alzheimer's disease. European Journal of Medicinal Chemistry 2018, 155, 839-846.

Ó. M. Bautista-Aguilera, J. Budni, F. Mina, E. Behenck Medeiros, W. Deuther-Conrad, J. M. Entrena, I. Moraleda, I. Iriepa, F. López-Muñoz and J. Marco-Contelles. Contilisant, a tetratarget small molecule for Alzheimer's disease therapy combining cholinesterase, monoamine oxidase inhibition and H3R antagonism with sigma 1R agonism profile. Journal of Medicinal Chemistry (Brief Article) 2018, 61, 6937-6943.

J. del Pino, J. Marco-Contelles, F. López-Muñoz, A. Romero and E. Ramos. Neuroinflammation signaling modulated by ASS234, a multitarget small molecule for Alzheimer disease therapy. ACS Chemical Neuroscience 2018, 9, 2880-2885.

## **PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS (conferencias invitadas, plenarias, etc.)**

Actividad: CONFERENCIA.

MuTaLig COST, CA15135 "Multi-Target Paradigm for Innovative Ligand Identification in the Drug Discovery Process".

19, 20 de Noviembre 2016; Budapest (Hungría).

Título: Multi-target-directed-ligands for Alzheimer's disease.

Actividad: CONFERENCIA, Invited Speaker Symposium No-58 («Novel therapeutics for neurodegenerative disorders »).

13<sup>th</sup> World Congress of Biological Psychiatry.

18-22 de Junio de 2017; Copenhagen (Dinamarca).

Título: ASS234, as a new Multi-Target Directed Propargylamine for Alzheimer's Disease Therapy.

Actividad: CONFERENCIA.

GENN38 (Almagro, Ciudad Real, España) (13-16 de Diciembre de 2017).

Título: Diseño, síntesis y evaluación biológica de nuevas moléculas tripotentes para terapia de la enfermedad de Alzheimer.

Actividad: CONFERENCIA.

Neurosciences Intégratives et Cliniques, EA 481? Univ. Franche-Comté, Univ. Bourgogne Franche-Comté, Laboratoire de Chimie Organique et Thérapeutique, UFR SMP, 19, rue Ambroise Paré, CHRU Besançon, F-25000 Besançon, France. 03-05-2018.

Título: Multi-Target Directed Propargylamines for Alzheimer's Disease Therapy.

Actividad: CONFERENCIA.

Instituto Químico de Sarriá (Barcelona). 27-09-2018.

Título: Multi-Target Directed Propargylamines for Alzheimer's Disease Therapy.

Actividad: CONFERENCIA.

GENN39 (Avilés, Oviedo, España) (12-15 de Diciembre de 2018)

Título: Contilisant, a tetratarget small molecule for Alzheimer's disease therapy combining cholinesterase, monoamine oxidase inhibition and H3R antagonism with sigma 1R agonism profile.

Actividad: CONFERENCIA.

GENN39 (Avilés, Oviedo, España) (12-15 de Diciembre de 2018)

Título: New quinolynitrones for stroke therapy: Antioxidant and neuroprotective.

(Z)-N-t-butyl-1-(2-chloro-6-methoxyquinolin-3-yl) methanimine oxide as a new lead compound for ischemic stroke treatment.



## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

### **Nuevas moléculas multipotentes para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer” (2014-35).**

Entidad financiadora: Universidad Camilo José Cela (Madrid).

Duración: 01-01-2015/ 31-12-2016.

Financiación: 19.000 Euros.

### **Moléculas para el tratamiento de enfermedades complejas relacionadas con la edad [SAF2015-65586-R (Biomedicina)].**

Entidad financiadora: MINECO.

Duración: 01-01-2016/ 31-12-2019.

Financiación: 160.000 Euros.

### **Centro Tecnológico para el Estudio y Tratamiento Integrado de Desórdenes Neurológicos (NEUROCENTRO-CM).**

Referencia: B2017/BMD3760.

Entidad financiadora: Ayudas para la realización de programa de actividades de I+D entre Grupos de Investigación de la CAM en tecnologías y biomedicina (Orden 2092/2017, 7 de junio de 2017, Comunidad de Madrid).

Duración: Enero de 2018-Diciembre 2021.

Financiación: 702.305,00 Euros.

Investigador principal: Gustavo Víctor Guinea (Universidad Politécnica de Madrid).

Jefe de Grupo: Dr. Ricardo Martínez-Murillo (I. Cajal, CSIC).

Miembros Equipo IQOG: Dr. J. L. Marco-Contelles, Dr. M. Chioua.

## PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Nuevos compuestos con capacidad antioxidante que combinan la inhibición de las enzimas monoaminoxidasas y colinesterasas y la interacción con el receptor de histamina 3, su procedimiento de obtención y composiciones farmacéuticas que los contienen. Marco Contelles, José Luis; López Muñoz, Francisco; Stark, Holger; Hagenow,

Stefanie; R. Ramsay, Rona. ES P201731044 (23-08-2017).

Quinolyl nitrones for the treatment and prevention of a cerebral stroke or ischaemia. Alcázar González, Alberto; Martínez Alonso, Enma; Marco Contelles, José Luis; Chioua Asri, Mourad. Application number: EP18382720.3 (10-10-2018).

## TFM, TFG, Y PRÁCTICAS EXTERNAS PRESENTADAS

### 2016

#### **Synthesis of new multitarget compounds derived from tacrine and 3,4-dihydropyrimidin-2(1h)-thiones frameworks for the potential treatment of alzheimer's disease**

Eleonora Buzzi.

Università degli Studi di Perugia. Dipartimento di scienze farmaceutiche.

Calificación: 107 sobre 110 (“Tesi di Laurea”).

Co-Dirección: Claudio Santi y Mourad Chioua.

#### **Síntesis y evaluación biológica de indanonitronas para el posible tratamiento de la isquemia cerebral.**

Alicia Jiménez Almarza.

Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Orgánica I. Facultad de Químicas.

Calificación: 7.5 (Máster Química Orgánica).

Co-Dirección: Mourad Chioua, Maria Jesús Oset-Gasque y Ricardo Martínez Murillo.

#### **Síntesis y evaluación farmacológica de nuevas quinolilnitronas para el posible tratamiento de la isquemia cerebral.**

Manuel Salgado Ramos.

Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Orgánica I. Facultad de Químicas.

Calificación: 7.5 (Máster Química Orgánica).

Co-Dirección: Mourad Chioua y Alberto Alcázar González.

**Evaluación farmacológica de nuevas nitronas para el posible tratamiento del ictus.**

Laura Mediavilla Santos.

Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Bioquímica y Biología Molecular II. Facultad de Farmacia.

Calificación: sobresaliente (grado en neurociencias).

Co-dirección: María J. Oset Gasque.

**Structure-based study of pbn derivatives against ischemic stroke.**

Alejandro Escobar Peso.

Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Química Orgánica I. Facultad de Químicas.

Calificación: sobresaliente (9) (máster química orgánica).

Co-dirección: Mourad Chioua y Alberto Alcázar González.

**2017**

**Quinopirantacrinas para el posible tratamiento de la enfermedad de alzheimer.**

Estefanía Serrano de la Brena.

Universidad de Alcalá de Henares. Departamento de Química Orgánica. Facultad de Químicas.

Calificación: sobresaliente (10) (máster química orgánica).

Co-dirección: Mourad Chioua e Isabel Iriepa Canalda.

**Estudio del efecto del producto mba121 sobre la progresión tumoral: análisis in vitro e in vivo.**

Estefanía Alonso Gómez.

Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias Químicas. 2017.

Calificación: 8,2 (máster en bioquímica, biología molecular y biomedicina).

Co-dirección: Ricardo Martínez Murillo.

**2018**

**Bis-nitronas derivadas de  $\alpha$ -fenil-n-tert-butil nitrona para el tratamiento de la isquemia cerebral**

Belén Merás Sáiz.

Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Química Orgánica. Facultad de Ciencias Químicas. 04-07-2018.

Calificación: 9.2 (grado química orgánica; memoria de prácticas externas).

Co-dirección: Mourad Chioua.

**Diseño, síntesis y estudio computacional de nuevas nitronas antioxidantes y neuroprotectoras para la terapia de la isquemia cerebral.**

Daniel Díez Iriepa.

Universidad de Alcalá de Henares. Departamento de Química Orgánica. Facultad de Químicas. 11-07-2018.

Calificación: 9.5 (máster universitario en investigación en ciencias especialidad de química).

Co-Dirección: Mourad Chioua e Isabel Iriepa Canalda.

**Estudio in vivo del posible efecto anti-alzheimer del producto mba121 en ratones machos.**

Emelina Ruth Rodríguez Ruiz.

Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias Biológicas. 28-09-2018.

Calificación: 8.8 (máster en neurociencias).

Co-dirección: Ricardo Martínez Murillo.

**Bis-nitronas derivadas de  $\alpha$ -fenil-tert-butil nitrona, como posibles agentes neuroprotectores en la isquemia cerebral.**

Beatriz Chamorro Gorines.

Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias Biológicas. 2018.

Calificación: 9.3 (máster en neurociencia).

Co-dirección: María J. Oset Gasque.

## PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

### 2016

LILLY Outstanding OIDD Collaborator.

### 2017

Premio Madri+d a la Mejor Patente. Accésit a la patente “Uso de esteroides para el tratamiento y prevención del ictus o accidente cerebrovascular, enfermedades de Alzheimer, Parkinson y Esclerosis Lateral Amiotrófica”, del doctor Alberto Alcázar, del Instituto Ramón y Cajal de Investigación Sanitaria (IRYCIS), y el Dr. J. L. Marco Contelles (CSIC).

Premio a la Proyección Internacional al Proyecto “Alzheimer” de la Universidad Camilo José Cela (Madrid, España).

## Grupo de Química Farmacéutica de los Compuestos de Azufre y Selenio



### Personal

#### Investigadores de plantilla

Enrique Domínguez Álvarez

#### Personal técnico

Miguel Benito de Lama

#### Personal en formación

Noemi Salardón Jiménez  
Ana González de Prádena  
Pablo Parra Pineda

En nuestro grupo se investiga en proyectos que buscan diseñar y sintetizar nuevos selenocompuestos con actividad biológica. Actualmente trabajamos en la síntesis de nuevos selenoésteres simétricos y asimétricos como agentes antitumorales, como compuestos antimicrobianos y como inhibidores de los mecanismos a través de los cuales las células tumorales o las cepas bacterianas resistentes escapan de la acción de los medicamentos. Nos centramos en la evaluación en líneas tumorales de cáncer de colon, y en la actividad de los compuestos contra bacterias como *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* y *Chlamydia trachomatis*.

Respecto a los mecanismos de resistencia, trabajamos en la inhibición de las bombas de eflujo, que son unas proteínas transportadoras de membrana que reconocen sustancias ajenas a la célula para captarlas y expulsarlas fuera. De esta forma reconocen a los medicamentos y los expulsan al exterior, evitando que actúen contra ellos, y por lo tanto escapando a su acción. La evaluación de la actividad biológica se realiza en centros colaboradores internacionales del investigador, en universidades y centros de investigación de Hungría, Polonia, Alemania y República Eslovaca.

### HITOS DESTACADOS

El Grupo de la Química Farmacéutica de los Compuestos de Azufre y Selenio se ha creado en marzo de 2017 y se ha puesto en marcha a lo largo del año 2017. Desde entonces se ha centrado en la síntesis de series de nuevos selenoésteres, que han presentado una muy buena actividad antiproliferativa e inhibidora de las bombas de eflujo en células tumorales. De hecho, en el 2018 se ha presentado una patente para proteger las series más prometedoras. En el año 2018 el grupo fue seleccionado para acoger y formar a un técnico de laboratorio durante dos años, dentro del programa de Garantía Juvenil organizado por la Comunidad de Madrid.



## PUBLICACIONES DESTACADAS

W. Ali, M. Álvarez-Pérez, M.A. Marć, N. Salardón-Jiménez, J. Handzlik, E. Domínguez-Álvarez. The anticancer and chemopreventive activity of selenocyanate-containing compounds. *Curr Pharmacol Rep*, 2018, 4(6), 468-481.

M. Gajdács, J. Handzlik, C. Sanmartín, E. Domínguez-Álvarez, G. Spengler. Prediction of ADME properties for selenocompounds with anticancer and efflux pump inhibitory activity using preliminary computational method. *Acta Pharmaceutica Hungarica*, 2018, 88(2), 67-74. Article in Hungarian.

M. Gajdács, J. Handzlik, C. Sanmartín, E. Domínguez-Álvarez, G. Spengler. Organoselenium compounds as antitumor agents: in vitro evaluation on a colon cancer model system. *Acta Pharmaceutica Hungarica*, 2018, 88(2), 59-66.

M. Álvarez-Pérez, W. Ali, M.A. Marć, J. Handzlik, E. Domínguez-Álvarez. Selenides and diselenides: a review of their anticancer and chemopreventive activity. *Molecules*, 2018, 23(3), 618.

M.A. Marć, E. Domínguez-Álvarez, K. Słoczyńska, P. Żmudzki, G. Chłoń-Rzepa, E. Pękala. In vitro biotransformation, safety and chemopreventive action of novel 8-methoxy-purine-2,6-dione derivatives. *Appl Biochem Biotechnol*, 2018, 184(1): 124-139.

E. Jabeen, N.K. Janjua, S. Ahmed, E. Domínguez-Álvarez, C. Jacob. A selective and sensitive monitoring of the OH radical using flavonoid-modified electrodes. *Electrochim Acta*, 2017, 258, 228-235.

J. Rendeková, D. Vlasáková, P. Arsenyan, J. Vasiljeva, M.J. Nasim, K. Witek, E. Domínguez-Álvarez, E. Żesławska, D. Mániková, W. Tejchman, R.S.Z. Saleem, K. Rory, J. Handzlik, M. Chovanec. The selenium-nitrogen bond as basis for reactive selenium species with pronounced antimicrobial activity. *Curr Org Synth*, 2017, 14(8), 1082-1090.

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

**Síntesis de nuevos selenocompuestos antitumorales y con actividad inhibitoria de los mecanismos de resistencia del cancer a los medicamentos.**

Entidad financiadora: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

Ref: 201780.

Duración: 12/2017 – 11/2018.

Investigador responsable: Enrique Domínguez Álvarez.

## LIBROS Y CAPÍTULOS DE LIBRO

M.J. Nasim, W. Ali, E. Domínguez-Álvarez, E.N. da Silva Júnior, R.S.Z. Saleem, C. Jacob. Reactive Selenium Species: Redox Modulation, Antioxidant, Antimicrobial and Anticancer Activities. Capítulo en: *Organoselenium Compounds in Biology and Medicine: Synthesis, Biological and Therapeutic Treatments*, publicado por la Royal Society of Chemistry, 2017, pp. 277-302.

## PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Selenoester-containing compounds for use in the treatment of microbial infections or colorectal cancer. E. Domínguez-Álvarez, G. Spengler, C. Jacob, M.C. Sanmartín. European patent application EP17382693. Filed on September 28th, 2018.

## Grupo de Química Bio - Organometálica



### Personal

#### Investigadores en plantilla

María del Carmen de la Torre Egido

#### Postdoctorales

Mónica Álvarez

#### Personal en formación

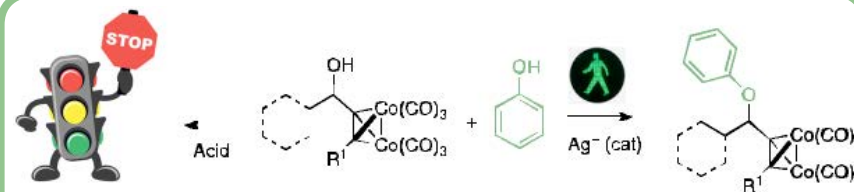
Marta García-Avello

María Moreno la Torre

En nuestro Grupo estamos interesados en la síntesis de nuevas entidades moleculares organometálicas conteniendo productos naturales, para el estudio de sus propiedades fisicoquímicas y biológicas, especialmente como agentes anticancerosos y antibacterianos. Con este objetivo, desarrollamos metodologías sintéticas basadas en la modificación estructural de productos naturales comerciales y sus derivados, utilizando nuevos complejos de metales de transición como catalizadores, o como reactivos en cantidades estequiométricas, desarrollados por nosotros.

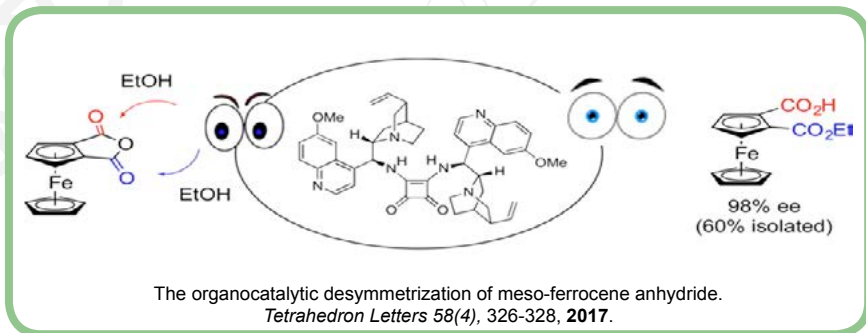
### HITOS DESTACADOS

**Reacción de Nicholas catalizada por Ag(I).** Por primera vez se han hecho reaccionar fenoles, como nucleófilos, en la reacción de Nicholas catalizada por Ag(I) o Au(I). Los correspondientes aductos se obtienen con excelentes rendimientos, en contraste con las condiciones clásicas en las que la reacción con fenoles no es posible.

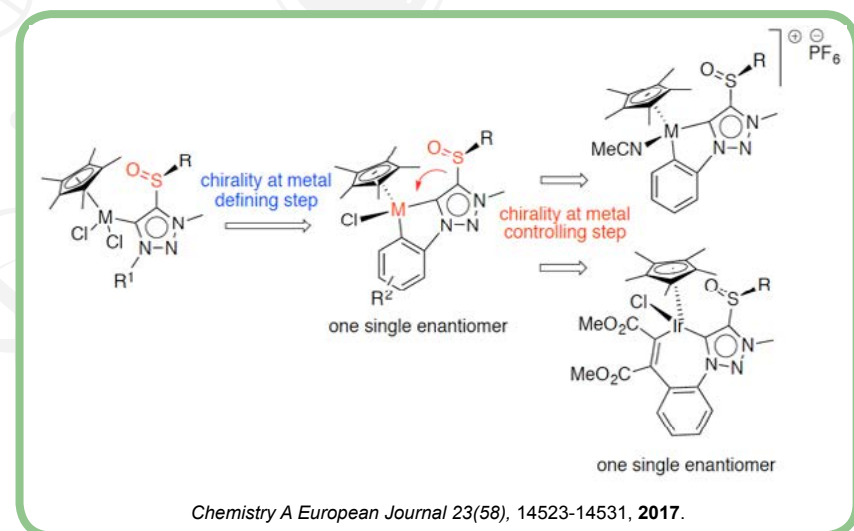


Silver(I)-Catalyzed Addition of phenols to Alkyne Cobalt Cluster Stabilized Carbocations.  
*Chemistry: A European Journal* 22 (26),9015-9023, 2016.

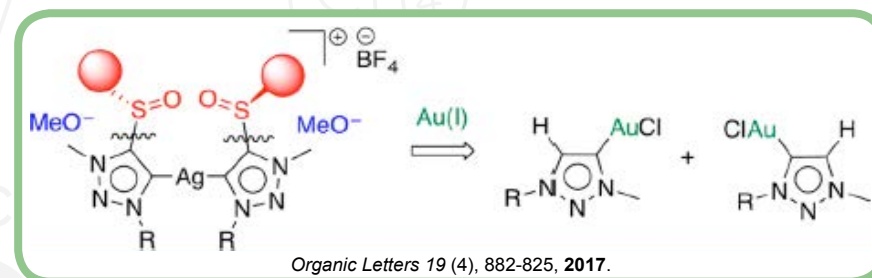
**Desimetrización organocatalítica de anhídridos derivados de ferroceno.** Se ha desarrollado un nuevo proceso para la desimetrización del anhídrido meso-ferroceno. La metodología se basa en una reacción de esterificación organocatalítica. Los mejores resultados se obtienen con catalizadores de tipo esquaramida.



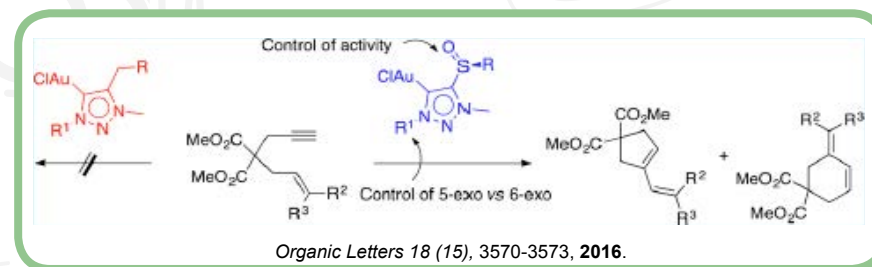
**Nuevos carbenos mesoiónicos enantiopuros de 1,2,3-triazolilidenos con azufre en su estructura.** Nuestro grupo ha desrito por primera vez la síntesis de carbenos mesoiónicos derivados de 1,2,3-triazolilidenos enantiopuros con un grupo sulfóxido quiral en su estructura. Con estos nuevos complejos hemos obtenido complejos semi-sandwich de manera completamente estereoselectiva. El proceso consiste en la activación de un C-H aromático que conduce a metalaciclos de cinco eslavones en los que el centro metálico es enantiopuro. En este proceso, el grupo sulfóxido actúa como auxiliar quiral.



**Reactividad de carbenos mesoiónicos de Ag(I) derivados de 1,2,3-triazolilidenos.** Por primera vez se ha descrito la desulfonilación de carbenos mesoiónicos de Ag(I) conteniendo un grupo sulfóxido enantiomericamente puro. Este proceso es concomitante con la transmetalación a Au(I) de los carbenos de Ag(I) en presencia de alcoholes primarios y secundarios, obteniéndose carbenos de Au(I) con ligados 1,2,3-triazol sin sustituyentes en el carbono C-4.



**Sulfonilcarbenos mesoiónicos de Au(I). Catálisis.** Los nuevos carbenos son muy eficientes como catalizadores en reacciones cicloisomerización, demostrándose que el fragmento sulfóxido es crucial en la selectividad del proceso.



## PUBLICACIONES DESTACADAS

C. Valderas, L. Casarrubios, A. Lledos, M. A. Ortuño, M. C. de la Torre, M. A. Sierra. Silver(I)-Catalyzed Addition of phenols to Alkyne Cobalt Cluster Stabilized Carbocations. *Chemistry: A European Journal* 22 (26),9015-9023, 2016.

C. Valderas, L. Marzo, M. C. de la Torre, J. L. García Ruano, J. A., L. Casarrubios, M. A. Sierra. "Mono- and Bimetallic Alkynyl Metallocenes and Half-Sandwich Complexes: A Simple and Versatile Synthetic Approach". Chem. Eur. J. 2016, 22, 15645-15649.

M. Frutos, M. G. Avello, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, M. C. de la Torre, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. "Gold Sulfinyl Mesoionic Carbenes: Synthesis, Structure, and Catalytic Activity" Org. Lett., 2016, 18, 3570–3573.

M. Frutos, M. A. Ortuño, A. Lledos, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, M. C. de la Torre, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. "Desulfinylation of Ag(I) Sulfinyl Mesoionic Carbenes: Preparation of C-Unsubstituted Au(I)-1,2,3-Triazole Carbene Complexes" Org. Lett., 2017, 19, 822–825.

M. Álvarez-Pérez, M. Velado, D. García-Puentes, E. Sáez, C. Vicent, R. Fernández de la Pradilla, A. Viso, M. C. de la Torre, M. A. Sierra. "Sulfur Groups Improve the Performance of Triazole- and Triazolium-Based Interaction Units in Anion Binding" J. Org. Chem., 2017, 82, 3341–3346.

M. Álvarez-Pérez, M. Frutos, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, M. C. de la Torre, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. "Gold(I)-Catalyzed Cycloisomerization-Dimerization Cascade of Benzene-Tethered 1,6-Enynes" J. Org. Chem., 2017, 82, 7546–7554.

M. G. Avello, M. Frutos, M. C. de la Torre, A. Viso, M. Velado, R. Fernández de la Pradilla, M. A. Sierra, H. Gornitzka, C. Hemmert. "Chiral Sulfur Functional Groups as Definers of the Chirality at the Metal in Ir- and Rh-Half Sandwich Complexes: A Combined CD/X-ray Study" Chem. Eur. J. 2017, 23, 14523–14531.

E. A. Giner, M. Gómez Gallego, L. Casarrubios, M. C. de la Torre, C. Ramírez de Arellano, M. A. Sierra. Effect of a  $\kappa 1$  Bonded-M-1,2,3-triazole (M = Co, Ru) on the Structure and Reactivity of Group 6 Alkoxy (Fischer) Carbenes. Inorg. Chem. 2017, 56, 2801-2811.

C Valderas, L. Casarrubios, M. C. de la Torre, M. A. Sierra. The organocatalytic desymmetrization of meso-ferrocene anhydride. Tetrahedron Letters 58(4), 326-328, 2017.

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

### **Moléculas biofuncionales moduladas por metales de transición: síntesis y aplicaciones.**

Entidad financiadora: MINECO.

ref: CTQ2016-77555-C2-2-R (20168L177).

Duración: 30/12/2016 - 30/09/2020.

Investigador responsable: María del Carmen de la Torre Egido.

### **Nuevas Entidades Moleculares y Catalizadores Basados en Complejos de Metales de Transición.**

Entidad financiadora: MINECO.

ref: CTQ2013-46459-C2-2-P.

Duración: 1/01/2014 - 30/09/2017.

Investigador responsable: María del Carmen de la Torre Egido.

### **Red Consolider Orfeo-Cinca "Centro De Innovacion En Quimica Avanzada".**

Entidad financiadora: MINECO.

ref: CTQ2016-81797-REDC.

Duración: 1/07/2017 - 30/09/2017.

Investigador responsable: Miguel A. Sierra Rodríguez.



## TESIS DOCTORAL

### Nuevos Complejos Metálicos de Carbenos Mesoiónicos

María Frutos Pastor

Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias Químicas. 25-10-2016. Tesis con mención Europea.

## MÁSTERES DE INVESTIGACIÓN

### Síntesis de Compuestos Dímeros Derivados de Hoechst y Manosa Mediante CuAAC

D. Alejandro Villacampa Sanagustín.

Septiembre 2017

Calificación: Sobresaliente



A person is working at a desk. In the foreground, a laptop is open, displaying a colorful, abstract image on its screen. To the right, a hand is holding a pen over a tablet device. The background is softly blurred, showing a desk lamp and a window with natural light. A green banner with white text is overlaid on the right side of the image.

## **4. UNIDADES DE APOYO**





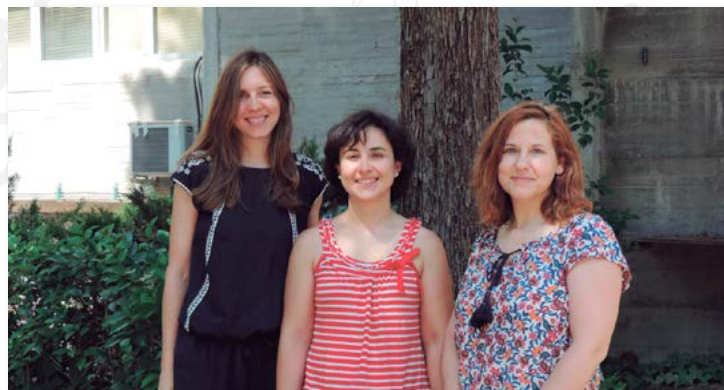
## Servicios Científico-Técnicos

### Catálogo de Prestaciones del CSIC

Lo más novedoso de este período en los SCT es la activación de nuestros servicios en el Catálogo de Prestaciones que el CSIC ha creado recientemente. Durante estos dos años se han dado de alta prácticamente todos los análisis que ofertamos pudiendo consultarlos a través de la Intranet del CSIC.

### Servicio de Espectrometría de Masas

El Servicio de Espectrometría de Masas comenzó su actividad en el año 2008 y tiene como objetivo fundamental servir de herramienta de apoyo a la investigación de los diferentes departamentos del IQOG así como a usuarios externos. El equipamiento disponible permite llevar a cabo el análisis por Espectrometría de Masas desde compuestos de bajo peso molecular hasta compuestos más complejos como polímeros y proteínas. Con ellos es posible llevar a cabo el análisis de moléculas de muy diferente naturaleza, pudiendo obtenerse tanto información cuantitativa como cualitativa, a través de la medida exacta de masa y de experimentos de masas en tándem. Actualmente se dispone en el Servicio de tres espectrómetros de masas con distintas configuraciones.



### Personal

#### Servicios científico-técnicos

Dra. Mercedes Pintado Sierra

#### Técnico de LC-MS-QTOF y GC-MS

Dra. Ana Isabel Ruiz Matute

#### Ayudantes de investigación

Dña. Sagrario Calvarro Sañudo

Dña. M<sup>a</sup> Belén Copano López

#### Personal en formación

D. Carles Savall Manzano

**Los Servicios Científico-Técnicos (SCT)** del Instituto de Química Orgánica General (IQOG) del CSIC tienen como objetivo principal proporcionar apoyo a la investigación de los diferentes Grupos y Departamentos de dicho Instituto y a otros institutos del CSIC dando también servicio a usuarios tanto de otros Organismos Públicos de Investigación como a usuarios externos de empresas privadas.

### Sistema LC-MS con analizador de tiempo de vuelo (QTOF)

Consta de un cromatógrafo de líquidos (Agilent 1200 LC) acoplado a un espectrómetro de masas con analizador híbrido Q-TOF (Agilent 6500 Accurate Mass). Posee fuentes de ionización ESI/APCI y un intervalo de masas de 25 - 20.000 u. Permite obtener una exactitud de masa de 1 - 2 ppm y una resolución máxima de 20.000 FWHM.



### Sistema GC-MS con analizador cuadrupolar

Está formado por un cromatógrafo de gases (Agilent 7890 A) acoplado a un espectrómetro de masas cuadrupolar (Agilent 5975 C). El sistema de inyección incorporado es del tipo split/splitless, y la fuente de ionización de impacto electrónico. El intervalo de masas que permite registrar es de 1 - 800 u.

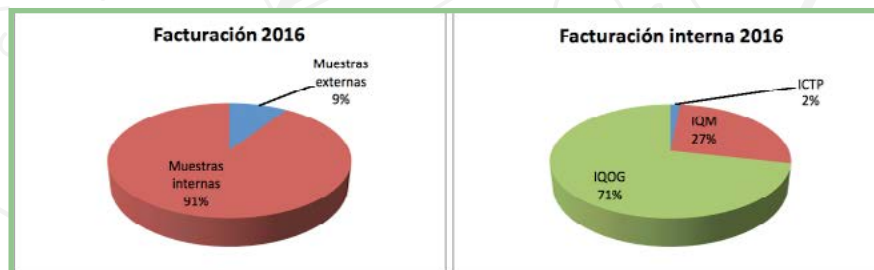


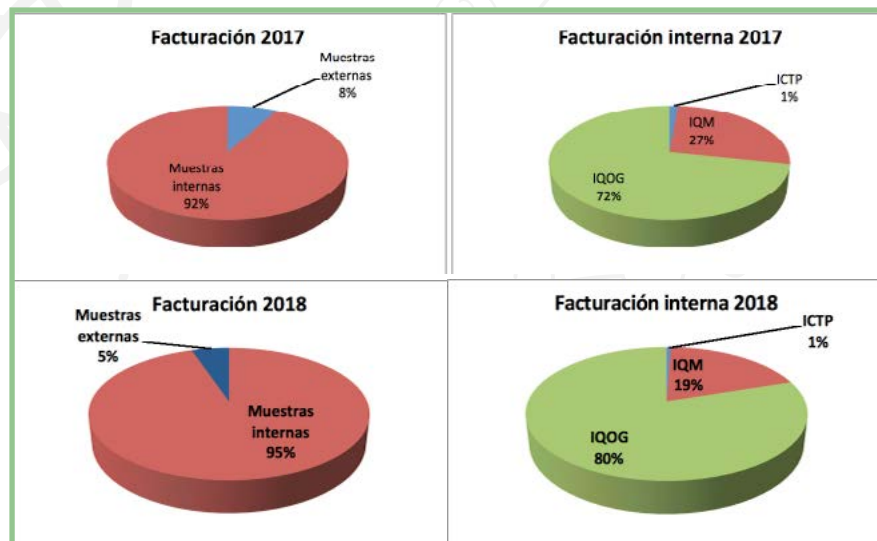
### Sistema LC-MS con analizador de triple cuadrupolo (QqQ)

Está constituido por un cromatógrafo de líquidos de ultra-alta presión (Waters Acquity UPLC H CLASS) acoplado a un espectrómetro de masas con analizador de triple cuadrupolo (Waters Xevo TQS). Dispone de fuentes de ionización ESI/APCI, permitiendo registrar espectros de masas en el intervalo 1 - 2.050 u.



En las siguientes gráficas se detalla el porcentaje de muestras de análisis de masas exactas realizados en el equipo de LC-MS (QTOF) durante los años 2016, 2017 y 2018, separadas en análisis internos (CENQUIOR) y externos y, dentro de los análisis internos agrupadas por Institutos.





Durante estos años el número de muestras realizadas osciló entre 1100-1300 anuales, de las cuales la mayoría fueron para usuarios internos del CSIC, siendo el propio Instituto (IQOG) el que más demanda de análisis de masas exactas generó (el 70-80 % del total), seguido del Instituto de Química Médica, IQM (27-20 %) y, en menor proporción, del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, ICTP (1-2 %). En 2016 se realizaron también distintas muestras para usuarios externos pertenecientes a: la Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED), el Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas (CNIO), el Instituto Madrileño de Estudios Avanzados (IMDEAenergía) y del Centro de Investigaciones Biológicas (CIB), suponiendo un 9,3 % del total de facturación de ese año. En 2017 también se realizaron muestras para el Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL), UNED y CIB, que correspondieron a un 8 % de la facturación total. En 2018 se llevaron a cabo muestras externas del CIB y de IMDEA Energía correspondiendo a un 5% de la facturación total.

La demanda de uso de los otros dos espectrómetros de masas (GC-MS y LC-MS-QqQ) fue únicamente para usuarios internos

(IQOG), siendo análisis rutinarios continuos y programados que les aportaron resultados relevantes para el desarrollo de sus proyectos de investigación.

De manera excepcional también se empleó el equipo de LC-MS-qTOF para la determinación cualitativa y/o cuantitativa de ciertos compuestos en matrices complejas.

## Unidad de Apoyo a la Investigación

La instrumentación con la que cuenta actualmente la Unidad está constituida por los siguientes equipos:

### Microcalorímetro modelo VP-ITC de MicroCal (MC).

La Calorimetría Isoterma de Valoración determina cambios de calor asociados a las interacciones entre dos biomoléculas y se emplea principalmente para determinar parámetros termodinámicos y de afinidad en biomoléculas como constantes, relación estequiométrica, entalpia y entropía.





**Dicroísmo circular modelo J-815 spectropolarimeter de Jasco (DC).**

El Dicroísmo Circular permite el estudio quiral de sustancias ópticamente activas y con cromóforos. Es posible determinar la configuración molecular o la estereoquímica de sustancias de forma rápida y sencilla.



**Polarímetro modelo P2000 de Jasco (POL).**

El Polarímetro permite medir de una manera automática la rotación óptica de moléculas activas ópticamente con alta precisión y a una temperatura controlada.



**Ultravioleta-visible modelo V-730 de Jasco (UV).**

El Ultravioleta-Visible permite la determinación del espectro electromagnético de una molécula, comprendiendo la región de longitudes de onda entre 800 y 200 nm. El instrumento es de doble haz y permite hacer tanto barridos como medidas puntuales a una longitud de onda fijada.



**Hidrogenador modelo 3900 Parr Instrument Company.**

El Hidrogenador-Parr es un compacto y sencillo sistema para tratar sustancias químicas con hidrógeno en presencia de un catalizador a presiones hasta 5 atm (60 psi) a temperatura ambiente. Su principal aplicación es la síntesis o modificación de compuestos orgánicos por hidrogenación catalítica, reducción o condensación.





**Microondas modelo Discover-S de CEM Corporation (1) y Micoondas modelo Monowave300 de Anton Paar (2).**

Estos Microondas está diseñados para acelerar ciertas reacciones químicas bajo condiciones controladas en una escala de laboratorio.



**Karl-Fischer modelo C20 de Mettler Toledo (KF).**

La valoración de Karl Fischer es el método de referencia específico para determinar el contenido de agua en una muestra y ofrece resultados precisos en tan solo unos minutos. Este equipo permite el análisis de agua (en ppm) de muestras líquidas.



**Generador de Ozono Modelo 500 de Fischer.**

El equipo genera Ozono es en una proporción determinada a partir de oxígeno gas. Se emplea generalmente en reacciones de oxidación.



**Cámara Seca MBraun.**

Esta cámara permite el almacenaje de reactivos en atmósfera inerte.



### Sistemas de Purificación de disolventes (SPS) de Scharlab.

Los SPS permiten el acceso de una forma rápida y sencilla a disolventes anhidros: DCM, DMF, ACN, THF, TOL, ETER.

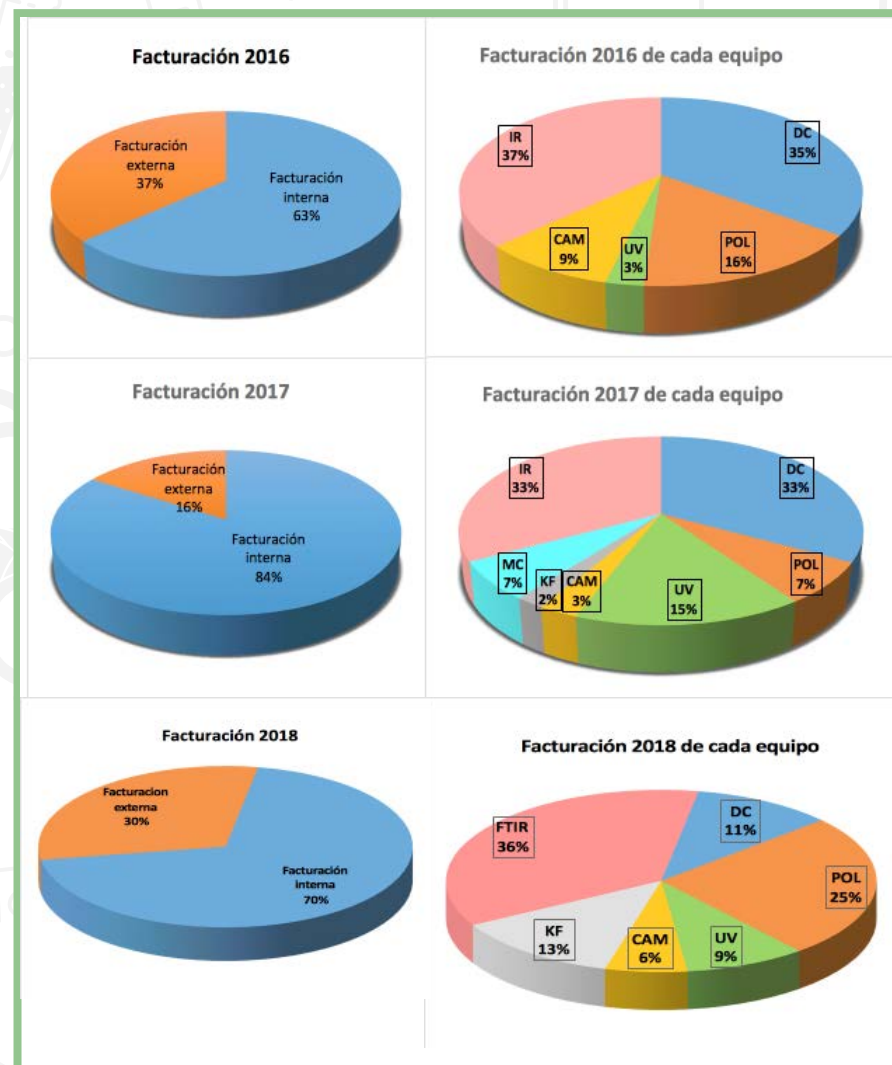


### Infrarrojo modelo Spectrum One B de Perkin-Elmer.

El Infrarrojo permite la determinación del espectro electromagnético infrarrojo de una molécula, comprendiendo la región de números de onda entre 4000 y 400  $\text{cm}^{-1}$ . Su principal aplicación es el análisis cualitativo, determinando los grupos funcionales presentes en la molécula.



En las siguientes gráficas se detallan el porcentaje de facturación interna y externa y la facturación por equipos durante el período 2016-2017-2018.



Durante estos años, la facturación fue, en 2016, en un 63% interna y en un 37% externa, mientras que, en 2017, aumentó el porcentaje de muestras internas llegando a un 84%. En el año 2018 la facturación externa aumentó con respecto al año anterior llegando hasta el 30% del total.

En cuanto a los equipos, Infrarrojo (FTIR), Dicroísmo Circular (DC) y Polarímetro (POL) son las técnicas que más ingresos reportan habitualmente a la UAI, suponiendo (juntas) entre el 88% y el 72% de la facturación anual dependiendo del año.

### Otras Actividades

Prácticas del curso “Cromatografía de Líquidos acoplada a Espectrometría de Masas” organizado por el Gabinete de Formación del CSIC en distintas ediciones (14-17 de noviembre de 2016 y 13-16 de noviembre de 2017).



Personal

#### Responsable del servicio

D. Patrick Moutel Márquez de Prado

El Servicio de Informática del IQOG se encarga de la gestión y el mantenimiento de los recursos informáticos del Instituto. Entre sus funciones figura la atención y soporte a usuarios y la resolución de incidencias de microinformática (tanto hardware como software), de informática científica y de comunicaciones en el entorno de red local e internet, en coordinación con el Servicio de TIC del CENQUIOR y la Secretaría General Adjunta de Informática del CSIC.

Asimismo, el Servicio es responsable de la administración de los servicios DNS, AD, antivirus y correo electrónico prestados desde la SGAI, así como del servicio web y servidores de archivos y de acceso.

<http://www.iqog.csic.es/es/servicios-iqog/servicio-de-informatica>







## **5. COMUNICACIÓN Y DIFUSIÓN DE LA CIENCIA**



El ciclo de conferencias del IQOG cuenta con una trayectoria de más de 15 años. Entre sus objetivos principales se encuentra la transmisión de temas actuales de investigación de la mano de los propios autores, estimulando el contacto entre los investigadores y del IQOG y los conferenciantes invitados a nuestro instituto.

Cada ciclo se desarrolla a lo largo de todo el año con una periodicidad semanal o quincenal. Las conferencias recogen temas actuales de investigación que abarcan desde distintas áreas de la química orgánica, analítica, biológica, médica, medioambiental, hasta otros temas de investigación afines que despiertan el interés de los investigadores del IQOG.

## CONFERENCIAS 2016

*27 de enero de 2016*

**Sensores y dosímetros químicos para la detección de compuestos peligrosos**

Dra. Ana Costero (Universidad de Valencia)

*17 de febrero de 2016*

**El role de la espectrometría de masas en la epidemiología de alcantarilla**

Dra. Yolanda Picó (Facultad de Farmacia, Universidad de Valencia)

*2 de marzo de 2016*

**Peptide Metal-Organic Frameworks by sidechain engineering**

Dr. Carlos Martí-Gastaldo (Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia)

*13 de abril de 2016*

**C-N Bond Forming Reactions with Copper Catalysts**

Dra. Silvia Díez (Imperial College, London)

*15 de abril de 2016*

**Aplicación de nanopartículas como sensores y biosensores**

Dra. M<sup>a</sup> José Martín Altaba (Universidad East Anglia, Norwich)

*19 de abril de 2016*

**A radical solution to an old problem. Some new perspectives for organic synthesis**

Dr. Samir Z. Zard (École Polytechnique de Palaiseau)

*20 de abril de 2016*

**Nuevas dianas terapéuticas en la patología cerebrovascular**

Dra. Ángeles Moro Sánchez (Facultad de Medicina, UCM)

*27 de abril de 2016*

**¿Pueden las zonas prístinas salvar nuestros océanos?**

Dr. Enrique Macpherson (Centro de Estudios Avanzados de Blanes, CSIC)

*28 de abril de 2016*

**Glycosylation studies and mass spectrometry**

Dr. Károly Vékey (Research Center for Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences)

*6 de mayo de 2016*

**Reciclado de materiales compuestos. Avances y retos para su implantación a escala industrial**

Dra. Sonia Melendi Espina (Universidad East Anglia, Norwich, Reino Unido)

11 de mayo de 2016

**Tuning pH-dependent metallodrugs to target the cancer microenvironment**

Dra. Ana Pizarro (IMDEA, Nanociencia)

18 de mayo de 2016

**Coupling peptide folding with chelation-enhanced luminescence for specific sensing of RNAs**

Dr. M. Eugenio Vázquez (CIQUS)

8 de junio de 2016

**Cromatografía líquida bidimensional: retos y soluciones para la separación de compuestos quirales**

Dra. M<sup>a</sup> Eugenia León-González (Facultad de Químicas, Universidad Complutense de Madrid)

29 de junio de 2016

**Nuevos BODIPYs para aplicaciones fotónicas avanzadas**

Dr. Santiago de la Moya (Universidad Complutense de Madrid)

28 de septiembre de 2016

**Nanocelluloses and multi-phase systems**

Dr. Orlando Rojas (Universidad Aalto, Finlandia)

5 de octubre de 2016

**Azido-dioles a partir de dioxigenación enzimática de bencil acida: Estudios mecanísticos y aplicaciones sintéticas**

Dr. Gustavo Seoane (Universidad de la República de Uruguay)

14 de octubre de 2016

**Chemical growth of metal nanoparticles, why and how?**

Dr. Luis M. Liz Marzán (Biomagune)

26 de octubre de 2016

**Lilly's Open Innovation Drug Discovery (OIDD) Program; early adventures in screening and remote synthesis**

Dr. Christopher Readle (Eli Lilly)

2 de noviembre de 2016

**System biocatalysis. new opportunities for synthetic organic chemistry**

Dr. Eduardo Bustos (Universidad Complutense de Madrid)

23 de noviembre de 2016

**Online electronic Lab Notebook for organic chemistry**

Dra. Silvia Mari (MESTRELAB RESEARCH)

30 de noviembre de 2016

**El alcaloide gramina como modelo para el diseño de compuestos multidiana**

Dr. Cristobal de los Ríos (Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Madrid)

14 de diciembre de 2016

**Stereocontrolled synthesis of carotenoids: a number of stories and a story of numbers**

Dr. Ángel Lera (Universidad de Vigo, Departamento de Química Orgánica)

## CONFERENCIAS 2017

25 de enero de 2017

**Evaluación del riesgo ecológico de contaminantes: situación actual y perspectivas futuras**

Dr. Andreu Rico (Instituto IMDEA agua)

08 de febrero de 2017

**Diseño, síntesis y aplicaciones biomédicas de péptidos**

Dra. Isabel Haro (Unidad de Síntesis y Aplicaciones Biomédicas de Péptidos, IQAC-CSIC)

22 de febrero de 2017

**Uso de aproximaciones in vitro para caracterizar la toxicidad de nanomateriales: desde nanopartículas metálicas al grafeno**

Dr. José María Navas (Departamento de Medio Ambiente del INIA)





Dr. Andreu Rico (Instituto IMDEA agua) 2017

19 de abril de 2017

**Discovery of new catalytic reactions for generation of molecular complexity and diversity**

Dr. John Montgomery (University of Michigan)

26 de abril de 2017

**Metodologías rápidas basadas en espectrometría de masas**

Dr. Carmelo García Pinto (Universidad de Salamanca)

10 de mayo de 2017

**Del Selenio a las Nanopartículas: del cáncer al cracking**

Dr. Enrique Domínguez (Departamento SEPCO, IQOG-CSIC)

Dr. José María Navas (Departamento de Medio Ambiente del INIA) 2017



31 de mayo de 2017

**Nanomaterials-based sensors for diagnostics**

Dr. Arben Merkoçi (Nanobioelectronics & Biosensors Group, Instituto Catalán Nanociencia y Nanotecnología)

2 de junio de 2017

**Immobilization of multi-enzyme systems; an avenue to fabricate self-sufficient heterogeneous biocatalysts**

Dr. Fernando López Gallego (Biofunctional Nanomaterials Department, CIC biomaGUNE)

21 de junio de 2017

**Development of novel drugs based on nucleic acids**

Dr. Ramón Eritja (Instituto de Química Avanzada de Cataluña, CSIC)

13 de septiembre de 2017

**La enzima ICMT como una nueva diana para el tratamiento de la progeria**

Dra. Silvia Ortega (Grupo de Química Médica y Biológica-MEDCHEMLAB. Universidad Complutense de Madrid)



Dr. Arben Merkoçi (Nanobioelectronics & Biosensors Group, Instituto Catalán Nanociencia y Nanotecnología) 2017

27 de septiembre de 2017

**A semi-synthetic approach to complex carbohydrates and glycolipids of biomedical interest**

Dr. Emiliano Bedini (Universidad de Nápoles Federico II, Italia)

29 de septiembre de 2017

**Analysis of protein glycosylation of high biomedical importance by capillary electrophoresis and its combination with mass spectrometry**

Dr. Andras Guttman (University of Debrecen, Hungría)

8 de noviembre de 2017

**Organosilanos como intermedios sintéticos en la síntesis de carbo- y heterociclos**

Dra. María Asunción Barbero (Departamento de Química Orgánica. Universidad de Valladolid)

21 de noviembre de 2017

**Carbohydrate-mediated polyphenol bioactivity: the role of C-glycosylation.**

Dra. Amélia Pilar Rauter (Departamento de Química e Bioquímica (DQB) e Centro de Química e Bioquímica (CQB), Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa)

22 de noviembre de 2017

**Aplicaciones de la proteómica en biomedicina. Mecanismos y biomarcadores en la enfermedad hepática**

Dr. Fernando Corrales (Laboratorio de Proteómica del CNB-CSIC)



Dra. Silvia Ortega (Grupo de Química Médica y Biológica-MEDCHEMLAB. Universidad Complutense de Madrid) 2017

Dr. Emiliano Bedini (Universidad de Nápoles Federico II, Italia) 2017



22 de noviembre de 2017

**Aplicaciones de la proteómica en biomedicina. Mecanismos y biomarcadores en la enfermedad hepática**

Dr. Fernando Corrales (Laboratorio de Proteómica del CNB-CSIC)



Dr. Andras Guttman (University of Debrecen, Hungría) 2017



Dra. Trinidad Velasco  
(Maynooth University,  
Irlanda)  
2018

Dr. Sergio Arana  
(Universidad de  
Navarra)  
2018



Dra. Auxiliadora  
Prieto (CIB, CSIC)  
2018

## CONFERENCIAS 2018

*17 de enero de 2018*

**Kinetics/mechanism = Facts/fiction**

Dr. Luis Simón Rubio (Universidad de Salamanca)

*28 de febrero de 2018*

**Producción biotecnológica de polímeros de base biológica mediante procesos sostenibles**

Dra. Auxiliadora Prieto (CIB, CSIC)

*14 de marzo de 2018*

**Simple synthetic tools – great outcome. from bio-hybrid catalysis to organometallic catalysis, Recent results**

Dr. Stelios Arseniyadis (Queen Mary, University of London)

*4 de abril de 2018*

**Glycomimetics: from supramolecular soft materials to inhibitors of pathogen infection**

Dra. Trinidad Velasco (Maynooth University, Irlanda)

*18 de abril de 2018*

**Las generaciones de la Edad de Plata: mentores y tutelados en la ciencia española**

Dr. Francisco González (Universidad Complutense de Madrid)

*23 de abril de 2018*

**Reversal of resistance: multidrug efflux pumps in bacteria and cancer cells and the role of efflux pump inhibitors**

Dra. Gabriella Spengler (University of Szeged, Hungría)

*9 de mayo de 2018*

**Role of conformational dynamics for the evolution of novel enzyme function**

Dra. Silvia Osuna (Universidad de Granada)

23 de mayo de 2018

**Organocatálisis tradicional asistida por enlace de hidrógeno**

Dra. Carmen Concellón (Universidad de Oviedo)

6 de junio de 2018

**Nuevos desarrollos metodológicos en seguridad alimentaria usando cromatografía líquida y electroforesis capilar**

Dra. Ana María García Campaña (Universidad de Granada)

13 de junio de 2018

**Ambient Ionization Mass Spectrometry: fundamental and applications for the analysis of organic compounds**

Dra. Encarnación Moyano (Universitat de Barcelona)

20 de junio de 2018

**Calidad de datos en investigación: DDW-GSK**

Dr. José María Coterón (GlaxoSmithKline)

27 de junio de 2018

**Micro y nanotecnología analíticas en los ámbitos del análisis clínico y agroalimentario**

Dr. Jesús Alberto Escarpa (Universidad de Alcalá)

24 de julio de 2018

**Chemical tools for mucopolysaccharidosis**

Dr. Vito Ferro (University of Queensland)

26 de octubre de 2018

**Copper-catalyzed asymmetric hydrofunctionalization of olefins**

Dr. Stephen L. Buchwald (MIT)

14 de noviembre de 2018

**Chemical tools for selective protein modification**

Dr. Omar Boutureira (Universtat Rovira i Virgili)

28 de noviembre de 2018

**Unconventional approaches to the enantioselective synthesis of complex carbo- and heterocyclic scaffolds**

Dr. José Luis Vicario (Universidad del País Vasco)

12 de diciembre de 2018

**Microtechnologies for Agro&food applications: food quality and food security**

Dr. Sergio Arana (Universidad de Navarra)



## Desayunos Científicos del IQOG

En el año 2015, el instituto puso en marcha los “Desayunos Científicos del IQOG”, iniciativa que consiste en ofrecer un pequeño desayuno seguido de dos breves intervenciones (de unos 20 minutos cada una), en las que, especialmente el personal investigador más joven, tiene la oportunidad de presentar el tema en el que están trabajando.

El objetivo de estas conferencias es dar a conocer los diferentes proyectos que se desarrollan en el instituto y fomentar así la interacción científica y personal de los investigadores en un ambiente distendido que invite a la participación.



Durante el año 2016 participaron en esta iniciativa cuatro de nuestros jóvenes investigadores pertenecientes a los distintos departamentos del IQOG.

### **3 de febrero de 2016**

- Porous Polymer Aromatic Frameworks (PAFs) as supports for enantioselective catalysis.  
Dr. Rodrigo Navarro (SEPCO).
- Herramientas químicas para el estudio de la interacción carbohidrato-ADN.  
D. Diego García (SEPCO).

### **21 de septiembre de 2016**

- Síntesis quimioenzimática de condroitin sulfato con patrón de sulfatación definido.  
Dña. Pilar Montero (QBO).
- Nuevas metodologías basadas en LC-MS para el análisis de oligosacáridos bioactivos de leche de cabra.  
Dña. Andrea Martín Ortiz (AIQA).

El IQOG continúa participando en las actividades desarrolladas en el marco de la Semana de la Ciencia que se celebra cada año durante el mes de noviembre en la Comunidad de Madrid. Las actividades son gratuitas y están dirigidas a todos los públicos, cubriendo diferentes edades y niveles de formación.

XVI Edición: 7 al 20 de noviembre de 2016

XVII Edición: 6 al 19 de noviembre de 2017

XVIII Edición: 5 al 18 de noviembre de 2018

El IQOG participa con diferentes actividades: las Jornadas de Puertas Abiertas “Todo es Química” y dos talleres “¿Quieres venir a preparar la aspirina?” y “Contaminantes tóxicos y persistentes. ¡Aprende a buscarlos e identificarlos!”.

## JORNADAS DE PUERTAS ABIERTAS “TODO ES QUÍMICA”

El Centro de Química Orgánica “Lora Tamayo” (CENQUIOR) organiza estas visitas guiadas en las que participan, además del IQOG y el CENQUIOR, el Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP), el Instituto de Química Médica (IQM) y el Instituto de Ciencia y Tecnología de los Alimentos y Nutrición (ICTAN).

Cerca de 300 estudiantes de distintos centros educativos, universidad y público en general visitaron el IQOG y disfrutaron de las actividades llevadas a cabo por los investigadores y que incluyeron, entre otros, los siguientes temas:

- Etapas de la síntesis de moléculas orgánicas.
- Elaboración de hilos de nailon y cristalización de acetato.
- Evolución del análisis cromatográfico.
- Aplicaciones de la espectrometría de masas acoplada a la cromatografía de líquidos.

- Investigación en un laboratorio de química ambiental.
- Análisis químico de la pureza de una pastilla de aspirina.
- Funcionamiento de un laboratorio de biocatálisis, como alternativa verde a la química orgánica tradicional.

## TALLER

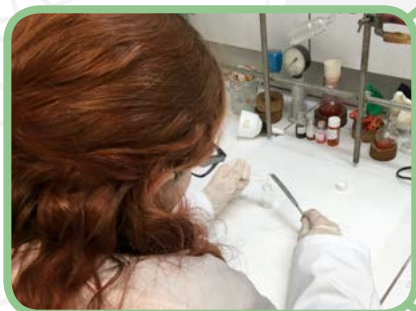
### “¿QUIERES VENIR A PREPARAR LA ASPIRINA?”

En esta actividad, cerca de 300 participantes realizaron una reacción de síntesis con el fin de preparar pastillas de aspirina, bajo la supervisión de los investigadores del Instituto.



## TALLER "CONTAMINANTES TÓXICOS Y PERSISTENTES. ¡APRENDE A BUSCARLOS E IDENTIFICARLOS!"

Este taller pretende dar a conocer dónde y cómo detectar los contaminantes químicos tóxicos y persistentes, así como concienciar y promover prácticas sostenibles.





# Programa 4º ESO + Empresa

El programa “4º ESO+Empresa” es una iniciativa de la Comunidad de Madrid para acercar el sistema educativo al entorno laboral y con el propósito de que los jóvenes estén mejor preparados en la elección de su futuro profesional. El IQOG se unió por primera vez a este programa en el año 2014 y desde entonces continúa colaborando de manera continuada.

Las estancias se desarrollaron durante los meses de marzo y abril de los años 2016, 2017 y 2018. Un total de 60 alumnos de distintos centros educativos madrileños visitaron el Instituto para conocer sus instalaciones y convivir con los investigadores en su trabajo diario. Durante tres días consecutivos, los estudiantes se convierten en investigadores y participan en las actividades que desarrollan los científicos. Se trata de mostrar a los jóvenes las posibilidades de la química y su relación con todas las ramas de la ciencia.

Las estancias comenzaron con la conferencia del investigador del IQOG, Bernardo Herradón: “¿Qué es la química?, ¿Qué hace un Químico?”, en la que el Dr. Herradón explica las tareas que puede llevar a cabo un químico y que no son exclusivas de esta área, ya que sectores como la alimentación, la sanidad, la nanotecnología, la sanidad o la industria, en definitiva, “todo” está relacionado con la química. El programa también incluyó visitas a los laboratorios, en las que los estudiantes participaron en distintos experimentos. Así, por ejemplo, los estudiantes que nos visitaron aprendieron para qué sirve y cómo se hace lleva a cabo un proceso de separación por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (LC-MS) o qué información aporta un equipo de RMN (Resonancia Magnética Nuclear) acerca de una molécula orgánica. Otras actividades que pudieron realizar los estudiantes incluían crear un polímero artificial que se puede expandir hasta formar un hilo, observar la cristalización del acetato sódico, el efecto de las bajas

temperaturas en los materiales al sumergirlos en nitrógeno líquido y la modulación de la velocidad de las reacciones químicas con ayuda de los baños criostáticos. Además, en el laboratorio de química ambiental aprendieron la importancia y necesidad de investigar la presencia de sustancias contaminantes en el entorno y las técnicas que se emplean para lograr su extracción, medición y control.

Además de las técnicas, también se mostraron los equipos que utilizan en sus experimentos, como los aparatos de resonancia magnética nuclear de última generación, el espectrómetro de masas y el infrarrojo, entre otros.

La mayoría de los estudiantes que visitaron el Instituto mostraron interés en cursar estudios superiores en el área de las ciencias químicas, por lo que consideraron muy positivamente la oportunidad de dejar las aulas y conocer de cerca el trabajo de los científicos durante unos días.

Fechas:

- 14 - 16 de marzo y 6 - 8 de abril de 2016
- 22 - 24 de marzo de 2017
- 19 - 21 de marzo y 4 - 6 de abril de 2018





## Curso de Divulgación “Los avances de la química y su impacto en la sociedad”

Este curso de divulgación se realiza de forma anual y está organizado por el investigador del IQOG Bernardo Herradón. A través de diferentes conferencias y mesas redondas se abordan temas que van desde las aplicaciones de la química en áreas tan diversas como la ciencia de materiales, biomateriales y enología, hasta la relación de la química con las ciencias de la vida, la energía, la toxicología y el desarrollo de fármacos. Las conferencias son impartidas por algunos de los científicos más relevantes de España, incluyendo varios académicos, premios nacionales de investigación, premios Jaime I, etc. El curso está dirigido a público en general ya que los temas son tratados con un carácter divulgativo, pero con rigor científico.

## Otras Actividades de Divulgación

Taller “**La contaminación global: ponte los guantes de un químico ambiental y contribuye a frenarla**”. Celebrado en el IQOG-CSIC el día 7 de junio de 2016, organizado por el periódico *El País*, y con la participación de los investigadores del IQOG Begoña Jiménez, Jose Luis Roscales y Juan Muñoz.

**Canal Divulgación** es un portal de divulgación científica de Youtube con vídeos que muestran, de forma sencilla y didáctica, distintas técnicas de laboratorio, métodos y temas relacionados con las actividades de investigación del Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC). Los vídeos han sido realizados íntegramente (filmación, dibujos, animación, etc.) por Guillermo Corrales, del departamento de Química Bio-orgánica del IQOG-CSIC. En poco más de dos años de existencia, Canal Divulgación ha alcanzado los 700 suscriptores y más de 300.000 visualizaciones. Se puede acceder directamente al portal en el siguiente enlace:  
<https://www.youtube.com/user/CanalDivulgacion>.

En la **página web del IQOG** ([www.iqog.csic.es](http://www.iqog.csic.es)) se recogen las novedades más importantes, noticias, eventos, publicaciones y ofertas de empleo, así como la actividad investigadora del personal científico del Instituto. Desde el año 2012, el IQOG también participa en distintas redes sociales, para dar a conocer y difundir todas las informaciones de actualidad, especialmente a través de Facebook y Twitter. La cuenta de Twitter ([@IQOG\\_CSIC](https://twitter.com/IQOG_CSIC)) cuenta con más de 1000 seguidores.

El IQOG acoge de forma regular visitas de estudiantes de distintos niveles para dar a conocer la ciencia y fomentar vocaciones científicas. El 26 de enero de 2017, nos visitaron 30 alumnos del IES Las Salinas, de Seseña. En su visita pudieron conocer las instalaciones del Instituto y algunas de las líneas de investigación que en él se desarrollan.



Por otro lado, el 18 de junio de 2018, los alumnos del Máster de Periodismo Audiovisual de la Universidad Nebrija-Antena 3 realizaron una visita al IQOG. A su llegada, el investigador del IQOG Bernardo Herradón impartió una breve presentación acerca del CSIC, el CENQUIOR y el IQOG. Posteriormente, divididos en grupos, los estudiantes se acercaron a los laboratorios de Glicoquímica Biológica, Síntesis Orgánica y Análisis Instrumental en Medio ambiente, Alimentos y Salud para conocer más de cerca las diferentes investigaciones que se llevan a cabo en el Instituto. Además, pudieron ver el funcionamiento y utilidad de los diversos

equipos de resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas. Por último, los alumnos entrevistaron a varios investigadores del Instituto y grabaron imágenes para elaborar una breve noticia de televisión sobre el mismo.

Los investigadores del IQOG también participan en diferentes actividades de divulgación organizadas por otras entidades públicas, colegios o institutos. A finales de enero – principios de febrero de 2018, el Colegio San Agustín de Salamanca organizó su “II Semana de Formación: Enseñar Educando”, iniciativa que tiene como objetivo fundamental acercar a los alumnos de ESO y Bachillerato a la realidad académica y profesional. Dentro de las actividades programadas para el día 1 de febrero, el director del Instituto, Dr. Eduardo García-Junceda, impartió una conferencia en la que habló de la química, de la investigación que se lleva a cabo en el Instituto y de las salidas profesionales que ofrece el mundo de la investigación.

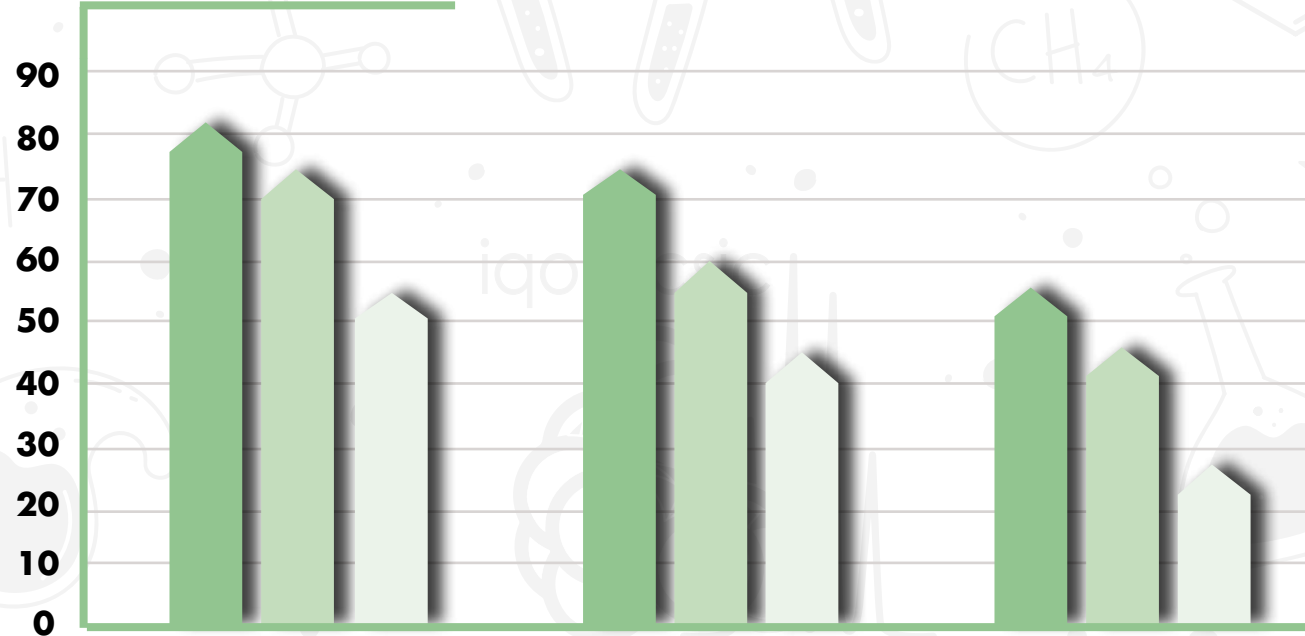


**6. ANEXO.  
PUBLICACIONES**





**PUBLICACIONES IQOG**



	2016	2017	2018
Total Publicaciones	83	75	56
Publicaciones Q1	75	60	46
Publicaciones D1	55	45	27

## 2016

Mello, F.V., Roscales, J.L., Guida, Y.S., Menezes, J.F.S., Vicente, A., Costa, E.S., Jiménez, B., Torres, J.P.M. Relationship between legacy and emerging organic pollutants in Antarctic seabirds and their foraging ecology as shown by  $\delta^{13}\text{C}$  and  $\delta^{15}\text{N}$ . (2016) *Science of the Total Environment*, 573, pp. 1380-1389. DOI: [10.1016/j.scitotenv.2016.07.080](https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.07.080).

Boulebd, H., Zama, S., Insaf, B., Bouraiou, A., Bouacida, S., Merazig, H., Romero, A., Chioua, M., Marco-Contelles, J., Belfaitah, A. Synthesis and biological evaluation of heterocyclic privileged medicinal structures containing (benz)imidazole unit. (2016) *Monatshefte fur Chemie*, 147 (12), pp. 2209-2220. DOI: [10.1007/s00706-016-1733-7](https://doi.org/10.1007/s00706-016-1733-7).

Patiño, P., Parada, E., Farré-Alins, V., Molz, S., Cacabelos, R., Marco-Contelles, J., López, M.G., Tasca, C.I., Ramos, E., Romero, A., Egea, J. Melatonin protects against oxygen and glucose deprivation by decreasing extracellular glutamate and Nox-derived ROS in rat hippocampal slices. (2016) *NeuroToxicology*, 57, pp. 61-68. DOI: [10.1016/j.neuro.2016.09.002](https://doi.org/10.1016/j.neuro.2016.09.002).

Romero, A., Ramos, E., Patiño, P., Oset-Gasque, M.J., López-Muñoz, F., Marco-Contelles, J. Melatonin and nitrones as potential therapeutic agents for stroke. (2016) *Frontiers in Aging Neuroscience*, 8 (NOV), art. no. 281. DOI: [10.3389/fnagi.2016.00281](https://doi.org/10.3389/fnagi.2016.00281).

Dorta, E., González, M., Lobo, M.G., Laich, F. Antifungal activity of mango peel and seed extracts against clinically pathogenic and food spoilage yeasts. (2016) *Natural Product Research*, 30 (22), pp. 2598-2604. DOI: [10.1080/14786419.2015.1115995](https://doi.org/10.1080/14786419.2015.1115995).

Smuszkiewicz, A., Lopez-Sanz, J., Sobczak, I., Ziolk, M., Martín-Aranda, R.M., Soriano, E., Pérez-Mayoral, E. Mesoporous niobiosilicate NbMCF modified with alkali metals in the synthesis of chromene derivatives. (2016) *Catalysis Today*, 277, pp. 133-142. DOI: [10.1016/j.cattod.2016.02.042](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.02.042).

Benchekroun, M., Romero, A., Egea, J., León, R., Michalska, P., Buendía, I., Jimeno, M.L., Jun, D., Janockova, J., Sepsova, V., Soukup, O., Bautista-Aguilera, O.M., Refouvelet, B., Ouari, O., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. The Antioxidant Additive Approach for Alzheimer's Disease Therapy: New Ferulic (Lipoic) Acid Plus Melatonin Modified Tacrines as Cholinesterases Inhibitors, Direct Antioxidants, and Nuclear Factor (Erythroid-Derived 2)-Like 2 Activators. (2016) *Journal of Medicinal Chemistry*, 59 (21), pp. 9967-9973. DOI: [10.1021/acs.jmedchem.6b01178](https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.6b01178).

Le, M.D., Duong, H.A., Nguyen, M.H., Sáiz, J., Pham, H.V., Mai, T.D. Screening determination of pharmaceutical pollutants in different water matrices using dual-channel capillary electrophoresis coupled with contactless conductivity detection. (2016) *Talanta*, 160, pp. 512-520. DOI: [10.1016/j.talanta.2016.07.032](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2016.07.032).

Lebrón-Aguilar, R., Soria, A.C., Quintanilla-López, J.E. Comprehensive evaluation of direct injection mass spectrometry for the quantitative profiling of volatiles in food samples. (2016) *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 374 (2079), art. no. 20150375. DOI: [10.1098/rsta.2015.0375](https://doi.org/10.1098/rsta.2015.0375).

Ruiz-Aceituno, L., García-Sarrió, M.J., Alonso-Rodríguez, B., Ramos, L., Sanz, M.L. Extraction of bioactive carbohydrates from artichoke (*Cynara scolymus* L.) external bracts using microwave assisted extraction and pressurized liquid extraction. (2016) *Food Chemistry*, 196, pp. 1156-1162. DOI: [10.1016/j.foodchem.2015.10.046](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.10.046).

Ramos, L., Richter, B. Extraction of micropollutants from size-limited solid samples. (2016) *LC-GC Europe*, 29 (10), pp. 558-568.

Muñoz-Arnanz, J., Roscales, J.L., Ros, M., Vicente, A., Jiménez, B. Towards the implementation of the Stockholm Convention in Spain: Five-year monitoring (2008–2013) of POPs in air based on passive sampling. (2016) *Environmental Pollution*, 217, pp. 107-113.  
**DOI: 10.1016/j.envpol.2016.01.052.**

Castro-Jiménez, J., González-Gaya, B., Pizarro, M., Casal, P., Pizarro-Álvarez, C., Dachs, J. Organophosphate ester flame retardants and plasticizers in the global oceanic atmosphere. (2016) *Environmental Science and Technology*, 50 (23), pp. 12831-12839.  
**DOI: 10.1021/acs.est.6b04344.**

García-Bermejo, A., Mohr, S., Herrero, L., González, M.-J., Gómara, B. Applicability of Gas Chromatography (GC) Coupled to Triple-Quadrupole (QqQ) Tandem Mass Spectrometry (MS/MS) for Polybrominated Diphenyl Ether (PBDE) and Emerging Brominated Flame Retardant (BFR) Determinations in Functional Foods Enriched in Omega-3. (2016) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 64 (38), pp. 7265-7274. **DOI: 10.1021/acs.jafc.6b03118.**

Sánchez-Moreno, I., García-Junceda, E., Hermida, C., Fernández-Mayoralas, A. Development of a new method for D-xylose detection and quantification in urine, based on the use of recombinant xylose dehydrogenase from *Caulobacter crescentus*. (2016) *Journal of Biotechnology*, 234, pp. 50-57. **DOI: 10.1016/j.jbiotec.2016.07.019.**

Gutiérrez, M., Sánchez, F., Douhal, A. Frontispiece: Competitive Excimer Formation and Energy Transfer in Zr-Based Heterolinker Metal–Organic Frameworks. (2016) *Chemistry - A European Journal*, 22 (37). **DOI: 10.1002/chem.201683762.**

Alcaide, B., Almendros, P., Aragoncillo, C., Gómez-Campillos, G., Quirós, M.T., Soriano, E. Tunable Metal-Catalyzed Heterocyclization

Reactions of Allenic Amino Alcohols: An Experimental and Theoretical Study. (2016) *Journal of Organic Chemistry*, 81 (17), pp. 7362-7372.  
**DOI: 10.1021/acs.joc.6b00934.**

Duong, H.A., Nguyen, T.D., Mai, T.D., Sáiz, J., Pham, H.V. Inexpensive and versatile measurement tools using purpose-made capillary electrophoresis devices coupled with contactless conductivity detection: A view from the case study in Vietnam. (2016) *Journal of Science: Advanced Materials and Devices*, 1 (3), pp. 273-281.  
**DOI: 10.1016/j.jsamd.2016.08.003.**

Ramos, E., Romero, A., Marco-Contelles, J., del Pino, J. Upregulation of Antioxidant Enzymes by ASS234, a Multitarget Directed Propargylamine for Alzheimer's Disease Therapy. (2016) *CNS Neuroscience and Therapeutics*, 22 (9), pp. 799-802.  
**DOI: 10.1111/cns.12590.**

Criado, M., Mulet, J., Sala, F., Sala, S., Colmena, I., Gandía, L., Bautista-Aguilera, O.M., Samadi, A., Chioua, M., Marco-Contelles, J. N-Benzylpiperidine Derivatives as  $\alpha 7$  Nicotinic Receptor Antagonists. (2016) *ACS Chemical Neuroscience*, 7 (8), pp. 1157-1165. **DOI: 10.1021/acschemneuro.6b00122.**

García-Font, N., Hayour, H., Belfaitah, A., Pedraz, J., Moraleda, I., Iriepa, I., Bouraiou, A., Chioua, M., Marco-Contelles, J., Oset-Gasque, M.J. Potent anticholinesterasic and neuroprotective pyranotacines as inhibitors of beta-amyloid aggregation, oxidative stress and tau-phosphorylation for Alzheimer's disease. (2016) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 118, pp. 178-192.  
**DOI: 10.1016/j.ejmech.2016.04.023.**

Frutos, M., Avello, M.G., Viso, A., Fernández De La Pradilla, R., De La Torre, M.C., Sierra, M.A., Gornitzka, H., Hemmert, C. Gold Sulfinyl Mesoionic Carbenes: Synthesis, Structure, and Catalytic Activity. (2016) *Organic Letters*, 18 (15), pp. 3570-3573. **DOI: 10.1021/acs.orglett.6b01555.**

Rodríguez-Sánchez, S., Martín-Ortiz, A., Carrero-Carralero, C., Ramos, S., Sanz, M.L., Soria, A.C. Pressurized liquid extraction of *Aglaonema* sp. iminosugars: Chemical composition, bioactivity, cell viability and thermal stability. (2016) *Food Chemistry*, 204, pp. 62-69. DOI: [10.1016/j.foodchem.2016.02.091](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.02.091).

Nguyen, T.A.H., Nguyen, V.R., Le, D.D., Nguyen, T.T.B., Cao, V.H., Nguyen, T.K.D., Sáiz, J., Hauser, P.C., Mai, T.D. Simultaneous determination of rare earth elements in ore and anti-corrosion coating samples using a portable capillary electrophoresis instrument with contactless conductivity detection. (2016) *Journal of Chromatography A*, 1457, pp. 151-158. DOI: [10.1016/j.chroma.2016.06.050](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2016.06.050).

Roscales, J.L., González-Solís, J., Zango, L., Ryan, P.G., Jiménez, B. Latitudinal exposure to DDTs, HCB, PCBs, PBDEs and DP in giant petrels (*Macronectes* spp.) across the Southern Ocean. (2016) *Environmental Research*, 148, pp. 285-294. DOI: [10.1016/j.envres.2016.04.005](https://doi.org/10.1016/j.envres.2016.04.005).

Estrada, M., Pérez, C., Soriano, E., Laurini, E., Romano, M., Prici, S., Morales-García, J.A., Pérez-Castillo, A., Rodríguez-Franco, M.I. New neurogenic lipoic-based hybrids as innovative Alzheimer's drugs with  $\sigma$ -1 agonism and  $\beta$ -secretase inhibition. (2016) *Future Medicinal Chemistry*, 8 (11), pp. 1191-1207. DOI: [10.4155/fmc-2016-0036](https://doi.org/10.4155/fmc-2016-0036).

Marco-Contelles, J., Unzeta, M., Bolea, I., Esteban, G., Ramsay, R.R., Romero, A., Martínez-Murillo, R., Carreiras, M.C., Ismaili, L. ASS234, as a new multi-target directed propargylamine for Alzheimer's disease Therapy. (2016) *Frontiers in Neuroscience*, 10 (JUN), art. no. 294. DOI: [10.3389/fnins.2016.00294](https://doi.org/10.3389/fnins.2016.00294).

González-Gaya, B., Fernández-Pinos, M.-C., Morales, L., Méjanelle, L., Abad, E., Piña, B., Duarte, C.M., Jiménez, B., Dachs, J. High atmosphere-ocean exchange of semivolatile aromatic hydrocarbons. (2016) *Nature Geoscience*, 9 (6), pp. 438-442. DOI: [10.1038/ngeo2714](https://doi.org/10.1038/ngeo2714).

Jiménez-Moreno, E., Montalvillo-Jiménez, L., Santana, A.G., Gómez, A.M., Jiménez-Osés, G., Corzana, F., Bastida, A., Jiménez-Barbero, J., Canada, F.J., Gómez-Pinto, I., González, C., Asensio, J.L. Finding the Right Candidate for the Right Position: A Fast NMR-Assisted Combinatorial Method for Optimizing Nucleic Acids Binders. (2016) *Journal of the American Chemical Society*, 138 (20), pp. 6463-6474. DOI: [10.1021/jacs.6b00328](https://doi.org/10.1021/jacs.6b00328).

Colomer, I., Gheewala, C., Simal, C., Velado, M., Fernández De La Pradilla, R., Viso, A. Sulfinyl-Mediated Stereoselective Overman Rearrangements and Diels-Alder Cycloadditions. (2016) *Journal of Organic Chemistry*, 81 (10), pp. 4081-4087. DOI: [10.1021/acs.joc.6b00365](https://doi.org/10.1021/acs.joc.6b00365).

Alarcos, N., Sánchez, F., Douhal, A. Spectroscopy and relaxation dynamics of salicylideneaniline derivative aggregates encapsulated in MCM41 and SBA15 pores. (2016) *Microporous and Mesoporous Materials*, 226, pp. 34-43. DOI: [10.1016/j.micromeso.2015.12.037](https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2015.12.037).

Ramos, K., Gómez-Gómez, M.M., Cámara, C., Ramos, L. Silver speciation and characterization of nanoparticles released from plastic food containers by single particle ICPMS. (2016) *Talanta*, 151, pp. 83-90. DOI: [10.1016/j.talanta.2015.12.071](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2015.12.071).

Roscales, J.L., Vicente, A., Muñoz-Arnanz, J., Morales, L., Abad, E., Aguirre, J.I., Jiménez, B. Influence of trophic ecology on the accumulation of dioxins and furans (PCDD/Fs), non-ortho polychlorinated biphenyls (PCBs), and polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) in Mediterranean gulls (*Larus michahellis* and *L. audouinii*): A three-isotope approach. (2016) *Environmental Pollution*, 212, pp. 307-315. DOI: [10.1016/j.envpol.2016.01.078](https://doi.org/10.1016/j.envpol.2016.01.078).

Dgachi, Y., Bautista-Aguilera, O.M., Benchekroun, M., Martin, H., Bonet, A., Knez, D., Godyń, J., Malawska, B., Gobec, S., Chioua, M., Janockova, J., Soukup, O., Chabchoub, F., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Synthesis and biological evaluation



of benzochromenopyrimidinones as cholinesterase inhibitors and potent antioxidant, non-hepatotoxic agents for Alzheimer's disease. (2016) *Molecules*, 21 (5), art. no. 634. DOI: [10.3390/molecules21050634](https://doi.org/10.3390/molecules21050634).

Blázquez-Moraleja, A., Pérez-Ojeda, M.E., Suárez, J.R., Jimeno, M.L., Chiara, J.L. Efficient multi-click approach to well-defined two-faced octasilsesquioxanes: The first perfect Janus nanocube. (2016) *Chemical Communications*, 52 (34), pp. 5792-5795. DOI: [10.1039/c6cc00896h](https://doi.org/10.1039/c6cc00896h).

Benítez-Páez, A., Moreno, F.J., Sanz, M.L., Sanz, Y. Genome structure of the symbiont *Bifidobacterium pseudocatenulatum* CECT 7765 and gene expression profiling in response to lactulose-derived oligosaccharides. (2016) *Frontiers in Microbiology*, 7 (APR), art. no. 624. DOI: [10.3389/fmicb.2016.00624](https://doi.org/10.3389/fmicb.2016.00624).

Alcaide, B., Almendros, P., Busto, E., Luna, A. Domino Meyer-Schuster/Arylation Reaction of Alkynols or Alkynyl Hydroperoxides with Diazonium Salts Promoted by Visible Light under Dual Gold and Ruthenium Catalysis. (2016) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 358 (9), pp. 1526-1533. DOI: [10.1002/adsc.201600158](https://doi.org/10.1002/adsc.201600158).

Alcaide, B., Almendros, P., Martín-Montero, R., Ruiz, M.P. Allene-Based Gold-Catalyzed Stereodivergent Synthesis of Azapolycyclic Derivatives of Unusual Structure. (2016) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 358 (9), pp. 1469-1477. DOI: [10.1002/adsc.201501145](https://doi.org/10.1002/adsc.201501145).

Manzano, H., Esnal, I., Marqués-Matesanz, T., Bañuelos, J., López-Arbelo, I., Ortiz, M.J., Cerdán, L., Costela, A., García-Moreno, I., Chiara, J.L. Unprecedented J-Aggregated Dyes in Pure Organic Solvents. (2016) *Advanced Functional Materials*, 26 (16), pp. 2756-2769. DOI: [10.1002/adfm.201505051](https://doi.org/10.1002/adfm.201505051).

Farina-Gomez, N., Puerta, A., Gonzalez, M., Diez-Masa, J.C., de Frutos, M. Impact of capillary conditioning and background electrolyte

composition on capillary electrophoresis analysis of prostate specific antigen isoforms. (2016) *Journal of Chromatography A*, 1443, pp. 254-261. DOI: [10.1016/j.chroma.2016.03.037](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2016.03.037).

Recalde, I., Estebanez, N., Francés-Soriano, L., Liras, M., González-Béjar, M., Pérez-Prieto, J. Upconversion nanoparticles with a strong acid-resistant capping. (2016) *Nanoscale*, 8 (14), pp. 7588-7594. DOI: [10.1039/c5nr06653k](https://doi.org/10.1039/c5nr06653k).

Redondo, J.A., Martínez-Campos, E., Plet, L., Pérez-Perrino, M., Navarro, R., Corrales, G., Pandit, A., Reinecke, H., Gallardo, A., López-Lacomba, J.L., Fernández-Mayoralas, A., Elvira, C. Polymeric Gene Carriers Bearing Pendant  $\beta$ -Cyclodextrin: The Relevance of Glycoside Permethylolation on the "in Vitro" Cell Response. (2016) *Macromolecular Rapid Communications*, 37 (7), pp. 575-583. DOI: [10.1002/marc.201500647](https://doi.org/10.1002/marc.201500647).

Boulebd, H., Ismaili, L., Bartolini, M., Bouraiou, A., Andrisano, V., Martin, H., Bonet, A., Moraleta, I., Iriepa, I., Chioua, M., Belfaitah, A., Marco-Contelles, J. Imidazopyranotacridines as Non-Hepatotoxic, Selective Acetylcholinesterase Inhibitors, and Antioxidant Agents for Alzheimer's Disease Therapy. (2016) *Molecules*, 21 (4), art. no. 400. DOI: [10.3390/molecules21040400](https://doi.org/10.3390/molecules21040400).

Liras, M., Iglesias, M., Sánchez, F. Conjugated Microporous Polymers Incorporating BODIPY Moieties as Light-Emitting Materials and Recyclable Visible-Light Photocatalysts. (2016) *Macromolecules*, 49 (5), pp. 1666-1673. DOI: [10.1021/acs.macromol.5b02511](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b02511).

Verde-Sesto, E., Merino, E., Rangel-Rangel, E., Corma, A., Iglesias, M., Sánchez, F. Postfunctionalized Porous Polymeric Aromatic Frameworks with an Organocatalyst and a Transition Metal Catalyst for Tandem Condensation-Hydrogenation Reactions. (2016) *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, 4 (3), pp. 1078-1084. DOI: [10.1021/acssuschemeng.5b01147](https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.5b01147).

De Andrés, E., Gómara, B., González-Paredes, D., Ruiz-Martín, J., Marco, A. Persistent organic pollutant levels in eggs of leatherback turtles (*Dermochelys coriacea*) point to a decrease in hatching success. (2016) *Chemosphere*, 146, pp. 354-361. DOI: [10.1016/j.chemosphere.2015.12.021](https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2015.12.021).

Martínez-Sáez, N., Supekar, N.T., Wolfert, M.A., Bermejo, I.A., Hurtado-Guerrero, R., Asensio, J.L., Jiménez-Barbero, J., Busto, J.H., Avenoza, A., Boons, G.-J., Peregrina, J.M., Corzana, F. Mucin architecture behind the immune response: Design, evaluation and conformational analysis of an antitumor vaccine derived from an unnatural MUC1 fragment. (2016) *Chemical Science*, 7 (3), pp. 2294-2301. DOI: [10.1039/c5sc04039f](https://doi.org/10.1039/c5sc04039f).

Gutiérrez, M., Sánchez, F., Douhal, A. Spectral and dynamical properties of a Zr-based MOF. (2016) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18 (7), pp. 5112-5120. DOI: [10.1039/c5cp04436g](https://doi.org/10.1039/c5cp04436g).

Koenka, I.J., Mai, T.D., Hauser, P.C., Sáiz, J. Simultaneous separation of cations and anions in capillary electrophoresis-recent applications. (2016) *Analytical Methods*, 8 (7), pp. 1452-1456. DOI: [10.1039/c5ay02917a](https://doi.org/10.1039/c5ay02917a).

Gullón, B., Montenegro, M.I., Ruiz-Matute, A.I., Cardelle-Cobas, A., Corzo, N., Pintado, M.E. Synthesis, optimization and structural characterization of a chitosan-glucose derivative obtained by the Maillard reaction. (2016) *Carbohydrate Polymers*, 137, pp. 382-389. DOI: [10.1016/j.carbpol.2015.10.075](https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2015.10.075).

Balmaña, M., Giménez, E., Puerta, A., Llop, E., Figueras, J., Fort, E., Sanz-Nebot, V., de Bolós, C., Rizzi, A., Barrabés, S., de Frutos, M., Peracaula, R. Increased  $\alpha$ 1-3 fucosylation of  $\alpha$ -1-acid glycoprotein (AGP) in pancreatic cancer. (2016) *Journal of Proteomics*, 132, pp. 144-154. DOI: [10.1016/j.jprot.2015.11.006](https://doi.org/10.1016/j.jprot.2015.11.006).

Tarazona, J.V., Rodríguez, C., Alonso, E., Sáez, M., González, F.,

San Andrés, M.D., Jiménez, B., San Andrés, M.I. Toxicokinetics of perfluorooctane sulfonate in rabbits under environmentally realistic exposure conditions and comparative assessment between mammals and birds. (2016) *Toxicology Letters*, 241, pp. 200-206. DOI: [10.1016/j.toxlet.2015.11.002](https://doi.org/10.1016/j.toxlet.2015.11.002).

Herradón, B., De Miguel, I., Mann, E. Rearrangements in Carbohydrate Templates to the Way to Peptide-Scaffold Hybrids and Functionalized Heterocycles. (2016) Domino and Intramolecular Rearrangement Reactions as *Advanced Synthetic Methods in Glycoscience*, pp. 279-296. DOI: [10.1002/9781119044222.ch14](https://doi.org/10.1002/9781119044222.ch14).

Martín-Ortiz, A., Salcedo, J., Barile, D., Bunyatratcata, A., Moreno, F.J., Martín-García, I., Clemente, A., Sanz, M.L., Ruiz-Matute, A.I. Characterization of goat colostrum oligosaccharides by nano-liquid chromatography on chip quadrupole time-of-flight mass spectrometry and hydrophilic interaction liquid chromatography-quadrupole mass spectrometry. (2016) *Journal of Chromatography A*, 1428, pp. 143-153. DOI: [10.1016/j.chroma.2015.09.060](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2015.09.060).

Hernandez-Hernandez, O., Quintanilla-Lopez, J.E., Lebron-Aguilar, R., Sanz, M.L., Moreno, F.J. Characterization of post-translationally modified peptides by hydrophilic interaction and reverse phase liquid chromatography coupled to quadrupole-time-of-flight mass spectrometry. (2016) *Journal of Chromatography A*, 1428, pp. 202-211. DOI: [10.1016/j.chroma.2015.07.096](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2015.07.096).

Alcaide, B., Almendros, P., Aragoncillo, C., Fernández, I., Gómez-Campillos, G. Metal-Free Allene-Based Synthesis of Enantiopure Fused Polycyclic Sultones. (2016) *Chemistry - A European Journal*, 22 (1), pp. 285-294. DOI: [10.1002/chem.201504045](https://doi.org/10.1002/chem.201504045).

Gómez, A.M., Lobo, F., López, J.C. Pyranose glycals in the generation of skeletal diversity. (2016) *Carbohydrate Chemistry*, 41, pp. 26-58. DOI: [10.1039/9781782620600-00026](https://doi.org/10.1039/9781782620600-00026).

Rasero-Almansa, A.M., Iglesias, M., Sánchez, F. Synthesis of bimetallic Zr(Ti)-naphthalendicarboxylate MOFs and their properties as Lewis acid catalysis. (2016) *RSC Advances*, 6 (108), pp. 106790-106797. DOI: [10.1039/c6ra23143h](https://doi.org/10.1039/c6ra23143h).

Nelson, R., Gulías, M., Mascareñas, J.L., López, F. Concise, Enantioselective, and Versatile Synthesis of (-)-Englerin A Based on a Platinum-Catalyzed [4C+3C] Cycloaddition of Allenedienes. (2016) *Angewandte Chemie - International Edition*, 55 (46), pp. 14359-14363. DOI: [10.1002/anie.201607348](https://doi.org/10.1002/anie.201607348).

de Miguel, I., Velado, M., Herradón, B., Mann, E. Synthetic studies on the application of the intramolecular azide-alkene 1,3-dipolar cycloaddition reaction in the construction of the core structure of complex alkaloids. (2016) *Tetrahedron*, 72 (31), pp. 4617-4625. DOI: [10.1016/j.tet.2016.06.023](https://doi.org/10.1016/j.tet.2016.06.023).

Fernández-Casado, J., Nelson, R., Mascareñas, J.L., López, F. Synergistic gold and enamine catalysis: Intermolecular  $\alpha$ -alkylation of aldehydes with allenamides. (2016) *Chemical Communications*, 52 (14), pp. 2909-2912. DOI: [10.1039/c5cc09533f](https://doi.org/10.1039/c5cc09533f).

Latorre, M., Revuelta, J., García-Junceda, E., Bastida, A. 6-O-Nucleotidyltransferase: An aminoglycoside-modifying enzyme specific for streptomycin/streptidine. (2016) *MedChemComm*, 7 (1), pp. 177-183. DOI: [10.1039/c5md00496a](https://doi.org/10.1039/c5md00496a).

Gutierrez, M., Cohen, B., Sánchez, F., Douhal, A. Photochemistry of Zr-based MOFs: Ligand-to-cluster charge transfer, energy transfer and excimer formation, what else is there? (2016) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18 (40), pp. 27761-27774. DOI: [10.1039/c6cp03791g](https://doi.org/10.1039/c6cp03791g).

Alcaide, B., Almendros, P., Cembellín, S., Fernández, I., Martínez Del Campo, T. Stereoselective synthesis of strained cage compounds: Via gold-catalyzed allene functionalization. (2016) *Chemical*

*Communications*, 52 (67), pp. 10265-10268. DOI: [10.1039/c6cc03779h](https://doi.org/10.1039/c6cc03779h).

Gutiérrez, M., Sánchez, F., Douhal, A. Competitive Excimer Formation and Energy Transfer in Zr-Based Heterolinker Metal–Organic Frameworks. (2016) *Chemistry - A European Journal*, 22 (37), pp. 13072-13082. DOI: [10.1002/chem.201600669](https://doi.org/10.1002/chem.201600669).

Alcaide, B., Almendros, P., Cembellín, S., Fernández, I., Martínez del Campo, T. Metal-Catalyzed Cyclization Reactions of 2,3,4-Trien-1-ols: A Joint Experimental–Computational Study. (2016) *Chemistry - A European Journal*, 22 (33), pp. 11667-11676. DOI: [10.1002/chem.201601838](https://doi.org/10.1002/chem.201601838).

de Miguel, I., Morales, E., Herradón, B., del Río, C., Mann, E. Synthesis and characterization of oligo(oxyethylene)-functionalized thiazolium based room temperature ionic liquids. (2016) *Tetrahedron Letters*, 57 (30), pp. 3291-3293. DOI: [10.1016/j.tetlet.2016.06.043](https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2016.06.043).

Alcaide, B., Almendros, P., Lázaro-Milla, C. Direct Metal-Free Entry to Aminocyclobutenes or Aminocyclobutenols from Ynamides: Synthetic Applications. (2016) *Chemistry - A European Journal*, 22 (26), pp. 8998-9005. DOI: [10.1002/chem.201601044](https://doi.org/10.1002/chem.201601044).

Alcaide, B., Almendros, P., Cembellín, S., Martínez Del Campo, T., Muñoz, A. Iron-catalyzed domino indole fluorination/allenic aza-Claisen rearrangement. (2016) *Chemical Communications*, 52 (41), pp. 6813-6816. DOI: [10.1039/c6cc02012g](https://doi.org/10.1039/c6cc02012g).

Pérez-Mayoral, E., Calvino-Casilda, V., Soriano, E. Metal-supported carbon-based materials: Opportunities and challenges in the synthesis of valuable products. (2016) *Catalysis Science and Technology*, 6 (5), pp. 1265-1291. DOI: [10.1039/c5cy01437a](https://doi.org/10.1039/c5cy01437a).

Esteve, C., Herrero, L., Gómara, B., Quintanilla-López, J.E. Fast and simultaneous determination of endocrine disrupting compounds



by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry. (2016) *Talanta*, 146, pp. 326-334. DOI: [10.1016/j.talanta.2015.08.064](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2015.08.064).

Liras, M., Pintado-Sierra, M., Iglesias, M., Sánchez, F. A deprotection strategy of a BODIPY conjugated porous polymer to obtain a heterogeneous (dipyrrin)(bipyridine)ruthenium(II) visible light photocatalyst. (2016) *Journal of Materials Chemistry A*, 4 (44), pp. 17274-17278. DOI: [10.1039/c6ta07696c](https://doi.org/10.1039/c6ta07696c).

Rangel-Rangel, E., Verde-Sesto, E., Rasero-Almansa, A.M., Iglesias, M., Sánchez, F. Porous aromatic frameworks (PAFs) as efficient supports for N-heterocyclic carbene catalysts. (2016) *Catalysis Science and Technology*, 6 (15), pp. 6037-6045. DOI: [10.1039/c6cy00597g](https://doi.org/10.1039/c6cy00597g).

Alcaide, B., Almendros, P., González, A.M., Luna, A., Martínez-Ramírez, S. Palladium Nanoparticles in Water: A Reusable Catalytic System for the Cycloetherification or Benzannulation of  $\alpha$ -Allenols. (2016) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 358 (12), pp. 2000-2006. DOI: [10.1002/adsc.201501132](https://doi.org/10.1002/adsc.201501132).

Castro-Osma, J.A., Lara-Sanchez, A., Otero, A., Rodríguez, A.M., de la Torre, M.C., Sierra, M.A. An Efficient and Tunable Route to Bis(1,2,3-triazol-1-yl)methane-Based Nitrogen Compounds. (2016) *European Journal of Organic Chemistry*, 2016 (4), pp. 682-687. DOI: [10.1002/ejoc.201501519](https://doi.org/10.1002/ejoc.201501519).

Valderas, C., Marzo, L., de la Torre, M.C., García Ruano, J.L., Alemán, J., Casarrubios, L., Sierra, M.A. Mono- and Bimetallic Alkynyl Metallocenes and Half-Sandwich Complexes: A Simple and Versatile Synthetic Approach. (2016) *Chemistry - A European Journal*, 22 (44), pp. 15645-15649. DOI: [10.1002/chem.201603462](https://doi.org/10.1002/chem.201603462).

Valderas, C., Casarrubios, L., Lledos, A., Ortuño, M.A., de la Torre, M.C., Sierra, M.A. Silver(I)-Catalyzed Addition of Phenols to

Alkyne Cobalt Cluster Stabilized Carbocations. (2016) *Chemistry - A European Journal*, 22 (26), pp. 9015-9023. DOI: [10.1002/chem.201600288](https://doi.org/10.1002/chem.201600288).

Uriel, C., Rijo, P., Fernandes, A.S., Gómez, A.M., Fraser-Reid, B., López, J.C. Methyl 1,2-Orthoesters in Acid-Washed Molecular Sieves Mediated Glycosylations. (2016) *ChemistrySelect*, 1 (18), pp. 6011-6015. DOI: [10.1002/slct.201601613](https://doi.org/10.1002/slct.201601613).

Tommonaro, G., García-Font, N., Vitale, R.M., Pejin, B., Iodice, C., Cañadas, S., Marco-Contelles, J., Oset-Gasque, M.J. Avarol derivatives as competitive AChE inhibitors, non hepatotoxic and neuroprotective agents for Alzheimer's disease. (2016) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 122, pp. 326-338. DOI: [10.1016/j.ejmech.2016.06.036](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.06.036).

Sales, C., Portolés, T., Sancho, J.V., Abad, E., Ábalos, M., Sauló, J., Fiedler, H., Gómara, B., Beltrán, J. Potential of gas chromatography-atmospheric pressure chemical ionization-tandem mass spectrometry for screening and quantification of hexabromocyclododecane. (2016) *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 408 (2), pp. 449-459. DOI: [10.1007/s00216-015-9146-8](https://doi.org/10.1007/s00216-015-9146-8).

Medel, S., Bosch, P., Grabchev, I., De La Torre, M.C., Ramírez, P. Click chemistry to fluorescent hyperbranched polymeric sensors. 2. Synthesis, spectroscopic and cation-sensing properties of new green fluorescent 1,8-naphthalimides. (2016) *European Polymer Journal*, 74, pp. 241-255. DOI: [10.1016/j.eurpolymj.2015.11.015](https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2015.11.015).

Wu, M.-Y., Esteban, G., Brogi, S., Shionoya, M., Wang, L., Campiani, G., Unzeta, M., Inokuchi, T., Butini, S., Marco-Contelles, J. Donepezil-like multifunctional agents: Design, synthesis, molecular modeling and biological evaluation. (2016) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 121, pp. 864-879. DOI: [10.1016/j.ejmech.2015.10.001](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2015.10.001).

Unzeta, M., Esteban, G., Bolea, I., Fogel, W.A., Ramsay, R.R.,



Youdim, M.B.H., Tipton, K.F., Marco-Contelles, J. Multi-target directed donepezil-like ligands for Alzheimer's disease. (2016) *Frontiers in Neuroscience*, 10 (MAY), art. no. 205. DOI: [10.3389/fnins.2016.00205](https://doi.org/10.3389/fnins.2016.00205).

Benek, O., Soukup, O., Pasdiorova, M., Hroch, L., Sepsova, V., Jost, P., Hrabinoval, M., Jun, D., Kuca, K., Zala, D., Ramsay, R.R., Marco-Contelles, J., Musilek, K. Design, Synthesis and in vitro Evaluation of Indolotacrine Analogues as Multitarget-Directed Ligands for the Treatment of Alzheimer's Disease. (2016) *ChemMedChem*, pp. 1264-1269. DOI: [10.1002/cmdc.201500383](https://doi.org/10.1002/cmdc.201500383).

Dgachi, Y., Ismaili, L., Knez, D., Benchekroun, M., Martin, H., Szałaj, N., Wehle, S., Bautista-Aguilera, O.M., Luzet, V., Bonnet, A., Malawska, B., Gobec, S., Chioua, M., Decker, M., Chabchoub, F., Marco-Contelles, J. Synthesis and Biological Assessment of Racemic Benzochromenopyrimidinimines as Antioxidant, Cholinesterase, and Aβ1-42 Aggregation Inhibitors for Alzheimer's Disease Therapy. (2016) *ChemMedChem*, pp. 1318-1327. DOI: [10.1002/cmdc.201500539](https://doi.org/10.1002/cmdc.201500539).

## 2017

Colomer, I., Velado, M., Fernández De La Pradilla, R., Viso, A. From Allylic Sulfoxides to Allylic Sulfenates: Fifty Years of a Never-Ending [2,3]-Sigmatropic Rearrangement. (2017) *Chemical Reviews*, 117 (24), pp. 14201-14243. DOI: [10.1021/acs.chemrev.7b00428](https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00428).

Jabeen, E., Janjua, N.K., Ahmed, S., Domínguez-Álvarez, E., Jacob, C. A selective and sensitive monitoring of the OH radical using flavonoid-modified electrodes. (2017) *Electrochimica Acta*, 258, pp. 228-235. DOI: [10.1016/j.electacta.2017.10.065](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.10.065).

Somovilla, V.J., Bermejo, I.A., Albuquerque, I.S., Martínez-Sáez, N., Castro-López, J., García-Martín, F., Compañón, I., Hinou, H.,

Nishimura, S.-I., Jiménez-Barbero, J., Asensio, J.L., Avenoza, A., Busto, J.H., Hurtado-Guerrero, R., Peregrina, J.M., Bernardes, G.J.L., Corzana, F. The Use of Fluoroproline in MUC1 Antigen Enables Efficient Detection of Antibodies in Patients with Prostate Cancer. (2017) *Journal of the American Chemical Society*, 139 (50), pp. 18255-18261. DOI: [10.1021/jacs.7b09447](https://doi.org/10.1021/jacs.7b09447).

Romero-Romero, S., Herrero, L., Fernández, M., Gómara, B., Acuña, J.L. Biomagnification of persistent organic pollutants in a deep-sea, temperate food web. (2017) *Science of the Total Environment*, 605-606, pp. 589-597. DOI: [10.1016/j.scitotenv.2017.06.148](https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.06.148).

Cristóbal López, J., del Rio, M., Oviden, A., Bañuelos, J., López-Arbeloa, I., García-Moreno, I., Gómez, A.M. Solvent-Sensitive Emitting Urea-Bridged bis-BODIPYs: Ready Access by a One-Pot Tandem Staudinger/Aza-Wittig Ureation. (2017) *Chemistry - A European Journal*, 23 (69), pp. 17511-17520. DOI: [10.1002/chem.201703383](https://doi.org/10.1002/chem.201703383).

Alcaide, B., Almendros, P., Fernández, I., Herrera, F., Luna, A. De Novo Synthesis of α-Hydroxy Ketones by Gallic Acid-Promoted Aerobic Coupling of Terminal Alkynes with Diazonium Salts. (2017) *Chemistry - A European Journal*, 23 (68), pp. 17227-17230. DOI: [10.1002/chem.201705106](https://doi.org/10.1002/chem.201705106).

Ruiz-Aceituno, L., Sanz, M.L., De Las Rivas, B., Muñoz, R., Kolida, S., Jimeno, M.L., Moreno, F.J. Enzymatic Synthesis and Structural Characterization of Theandrose through Transfructosylation Reaction Catalyzed by Levansucrase from *Bacillus subtilis* CECT 39. (2017) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65 (48), pp. 10505-10513. DOI: [10.1021/acs.jafc.7b03092](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.7b03092).

García-Roa, R., Saíz, J., Gómara, B., López, P., Martín, J. Dietary constraints can preclude the expression of an honest chemical sexual signal/631/158/856/631/158/670/631/158/2455/101 article. (2017) *Scientific Reports*, 7 (1), art. no. 6073. DOI: [10.1038/s41598-017-06323-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-06323-8).

Rendeková, J., Vlasáková, D., Arsenyan, P., Vasiljeva, J., Nasim, M.J., Witek, K., Domínguez-Álvarez, E., Żesławska, E., Mániková, D., Tejchman, W., Saleem, R.S.Z., Rory, K., Handzlik, J., Chovanec, M. The selenium-nitrogen bond as basis for reactive selenium species with pronounced antimicrobial activity. (2017) *Current Organic Synthesis*, 14 (8), pp. 1082-1090. DOI: [10.2174/1570179414666170525104735](https://doi.org/10.2174/1570179414666170525104735).

Zribi, L., Zribi, F., Marco-Contelles, J., Chabchoub, F., Ismaili, L. Facile one-pot synthesis of new [1,2,4]triazolo[1,5-a]pyridine derivatives by ultrasonic irradiation. (2017) *Synthetic Communications*, 47 (21), pp. 1934-1939. DOI: [10.1080/00397911.2017.1357078](https://doi.org/10.1080/00397911.2017.1357078).

Raynie, D., Lee, H.K., Ramos, L., Anderson, J.L., Psillakis, E., Benanou, D. Sample preparation: *The state of the art*. (2017) *LC-GC Europe*, 30 (11), pp. 604-608.

Castro-Jiménez, J., Barhoumi, B., Paluselli, A., Tedetti, M., Jiménez, B., Muñoz-Arnanz, J., Wortham, H., Driss, M.R., Sempéré, R. Occurrence, Loading, and Exposure of Atmospheric Particle-Bound POPs at the African and European Edges of the Western Mediterranean Sea. (2017) *Environmental Science and Technology*, 51 (22), pp. 13180-13189. DOI: [10.1021/acs.est.7b04614](https://doi.org/10.1021/acs.est.7b04614).

Ayuso, M.I., Martínez-Alonso, E., Chioua, M., Escobar-Peso, A., Gonzalo-Gobernado, R., Montaner, J., Marco-Contelles, J., Alcázar, A. Quinolinyl Nitro RP19 Induces Neuroprotection after Transient Brain Ischemia. (2017) *ACS Chemical Neuroscience*, 8 (10), pp. 2202-2213. DOI: [10.1021/acschemneuro.7b00126](https://doi.org/10.1021/acschemneuro.7b00126).

Avello, M.G., Frutos, M., de la Torre, M.C., Viso, A., Velado, M., de la Pradilla, R.F., Sierra, M.A., Gornitzka, H., Hemmert, C. Chiral Sulfur Functional Groups as Definers of the Chirality at the Metal in Ir and Rh Half-Sandwich Complexes: A Combined CD/X-ray Study. (2017) *Chemistry - A European Journal*, 23 (58), pp. 14523-14531. DOI: [10.1002/chem.201702662](https://doi.org/10.1002/chem.201702662).

Alcaide, B., Almendros, P., Cembellín, S., Martínez del Campo, T., Palop, G. Allenols versus Allenones: Rhodium-Catalyzed Regiodivergent and Tunable Allene Reactivity with Triazoles. (2017) *Chemistry - A European Journal*, 23 (55), pp. 13754-13759. DOI: [10.1002/chem.201702468](https://doi.org/10.1002/chem.201702468).

Liras, M., Verde-Sesto, E., Iglesias, M., Sánchez, F. Synthesis of polyesters by an efficient heterogeneous phosphazene (P1)-Porous Polymeric Aromatic Framework catalyzed-Ring Opening Polymerization of lactones. (2017) *European Polymer Journal*, 95, pp. 775-784. DOI: [10.1016/j.eurpolymj.2017.04.007](https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2017.04.007).

Sáiz, J., García-Roa, R., Martín, J., Gómara, B. Fast, sensitive, and selective gas chromatography tandem mass spectrometry method for the target analysis of chemical secretions from femoral glands in lizards. (2017) *Journal of Chromatography A*, 1514, pp. 110-119. DOI: [10.1016/j.chroma.2017.07.068](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2017.07.068).

Alarcos, N., Sánchez, F., Douhal, A. Interrogating ultrafast dynamics of a salicylideneaniline derivative within faujasite zeolites. (2017) *Chemical Physics Letters*, 683, pp. 145-153. DOI: [10.1016/j.cplett.2017.02.024](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.02.024).

Fossi, M.C., Bainsi, M., Panti, C., Galli, M., Jiménez, B., Muñoz-Arnanz, J., Marsili, L., Finaoia, M.G., Ramírez-Macías, D. Are whale sharks exposed to persistent organic pollutants and plastic pollution in the Gulf of California (Mexico)? First ecotoxicological investigation using skin biopsies. (2017) *Comparative Biochemistry and Physiology Part - C: Toxicology and Pharmacology*, 199, pp. 48-58. DOI: [10.1016/j.cbpc.2017.03.002](https://doi.org/10.1016/j.cbpc.2017.03.002).

Alcaide, B., Almendros, P., Aparicio, B., Lázaro-Milla, C., Luna, A., Faza, O.N. Gold-Photoredox-Cocatalyzed Tandem Oxycyclization/Coupling Sequence of Allenols and Diazonium Salts with Visible Light Mediation. (2017) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 359 (16), pp. 2789-2800. DOI: [10.1002/adsc.201700598](https://doi.org/10.1002/adsc.201700598).

Sáiz, J., Gómara, B. Evaluation of Endocrine Disrupting Compounds Migration in Household Food Containers under Domestic Use Conditions. (2017) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65 (31), pp. 6692-6700. DOI: [10.1021/acs.jafc.7b02479](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.7b02479).

Alcaide, B., Almendros, P., Lázaro-Milla, C. Regioselective Synthesis of Heteroatom-Functionalized Cyclobutene-triflones and Cyclobutenones. (2017) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 359 (15), pp. 2630-2639. DOI: [10.1002/adsc.201700492](https://doi.org/10.1002/adsc.201700492).

Alcaide, B., Almendros, P., Busto, E., Herrera, F., Lázaro-Milla, C., Luna, A. Photopromoted Entry to Benzothiophenes, Benzoselenophenes, 3H-Indoles, Isocoumarins, Benzosultams, and (Thio)flavones by Gold-Catalyzed Arylative Heterocyclization of Alkynes. (2017) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 359 (15), pp. 2640-2652. DOI: [10.1002/adsc.201700427](https://doi.org/10.1002/adsc.201700427).

Roscales, J.L., Vicente, A., Ramos, L., Jiménez, B. Miniaturised sample preparation method for the multiresidual determination of regulated organohalogenated pollutants and related compounds in wild bird eggs. (2017) *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 409 (20), pp. 4905-4913. DOI: [10.1007/s00216-017-0432-5](https://doi.org/10.1007/s00216-017-0432-5).

Redondo, J.A., Martínez-Campos, E., Navarro, R., Pérez-Perrino, M., Reinecke, H., Gallardo, A., Corrales, G., Fernández-Mayoralas, A., Elvira, C. Hydroxyl versus permethylated glycopolymers as gene carriers. (2017) *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 117, pp. 68-76. DOI: [10.1016/j.ejpb.2017.04.001](https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2017.04.001).

Casal, P., Zhang, Y., Martin, J.W., Pizarro, M., Jiménez, B., Dachs, J. Role of Snow Deposition of Perfluoroalkylated Substances at Coastal Livingston Island (Maritime Antarctica). (2017) *Environmental Science and Technology*, 51 (15), pp. 8460-8470. DOI: [10.1021/acs.est.7b02521](https://doi.org/10.1021/acs.est.7b02521).

Álvarez-Pérez, M., Frutos, M., Viso, A., Fernández De La Pradilla, R.,

De La Torre, M.C., Sierra, M.A., Gornitzka, H., Hemmert, C. Gold(I)-Catalyzed Cycloisomerization-Dimerization Cascade of Benzene-Tethered 1,6-Enynes. (2017) *Journal of Organic Chemistry*, 82 (14), pp. 7546-7554. DOI: [10.1021/acs.joc.7b01273](https://doi.org/10.1021/acs.joc.7b01273).

Vélez, J.F., Álvarez, L.V., del Río, C., Herradón, B., Mann, E., Morales, E. Imidazolium-based Mono and Dicationic Ionic Liquid Sodium Polymer Gel Electrolytes. (2017) *Electrochimica Acta*, 241, pp. 517-525. DOI: [10.1016/j.electacta.2017.04.096](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.04.096).

Crevillén, A.G., de Frutos, M., Diez-Masa, J.C. On-chip single column transient isotachopheresis with free zone electrophoresis for preconcentration and separation of  $\alpha$ -lactalbumin and  $\beta$ -lactoglobulin. (2017) *Microchemical Journal*, 133, pp. 600-606. DOI: [10.1016/j.microc.2017.04.040](https://doi.org/10.1016/j.microc.2017.04.040).

Romero, A., Ramos, E., Patiño, P., Oset-Gasque, M.J., López-Muñoz, F., Marco-Contelles, J., Ayuso, M.I., Alcázar, A. Corrigendum: Melatonin and nitrones as potential therapeutic agents for stroke [Front. Aging Neurosci., 8 (2016) (281) DOI:10.3389/fnagi.2016.00281] (2017) *Frontiers in Aging Neuroscience*, 9 (MAY), art. no. 159. DOI: [10.3389/fnagi.2017.00159](https://doi.org/10.3389/fnagi.2017.00159).

Sáiz, J., García-Ruiz, C., Gómara, B. Comparison of different GC-MS configurations for the determination of prevalent drugs and related metabolites. (2017) *Analytical Methods*, 9 (19), pp. 2897-2908. DOI: [10.1039/c7ay00813a](https://doi.org/10.1039/c7ay00813a).

De Deurwaerdère, P., Binda, C., Corne, R., Leone, C., Valeri, A., Valoti, M., Ramsay, R.R., Fall, Y., Marco-Contelles, J. Comparative Analysis of the Neurochemical Profile and MAO Inhibition Properties of N-(Furan-2-ylmethyl)-N-methylprop-2-yn-1-amine. (2017) *ACS Chemical Neuroscience*, 8 (5), pp. 1026-1035. DOI: [10.1021/acscemneuro.6b00377](https://doi.org/10.1021/acscemneuro.6b00377).

Alcaide, B., Almendros, P., Aragoncillo, C. Synthesis of five-



membered heterocycles through  $\beta$ -lactam ring-expansion reaction. (2017) *Beta-Lactams: Novel Synthetic Pathways and Applications*, pp. 163-218. DOI: [10.1007/978-3-319-55621-5\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-319-55621-5_6).

Martín-Ortiz, A., Barile, D., Salcedo, J., Moreno, F.J., Clemente, A., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Changes in Caprine Milk Oligosaccharides at Different Lactation Stages Analyzed by High Performance Liquid Chromatography Coupled to Mass Spectrometry. (2017) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65 (17), pp. 3523-3531. DOI: [10.1021/acs.jafc.6b05104](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.6b05104).

Dgachi, Y., Martin, H., Bonet, A., Chioua, M., Iriepa, I., Moraleda, I., Chabchoub, F., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Synthesis and biological assessment of racemic benzochromenopyrimidinetriones as promising agents for Alzheimer's disease therapy. (2017) *Future Medicinal Chemistry*, 9 (8), pp. 715-721. DOI: [10.4155/fmc-2017-0004](https://doi.org/10.4155/fmc-2017-0004).

Boulebd, H., Ismaili, L., Martin, H., Bonet, A., Chioua, M., Marco Contelles, J., Belfaitah, A. New (benz)imidazolopyridino tacrines as nonhepatotoxic, cholinesterase inhibitors for Alzheimer disease. (2017) *Future Medicinal Chemistry*, 9 (8), pp. 723-729. DOI: [10.4155/fmc-2017-0019](https://doi.org/10.4155/fmc-2017-0019).

Ramos, E., Egea, J., De Los Ríos, C., Marco-Contelles, J., Romero, A. Melatonin as a versatile molecule to design novel multitarget hybrids against neurodegeneration. (2017) *Future Medicinal Chemistry*, 9 (8), pp. 765-780. DOI: [10.4155/fmc-2017-0014](https://doi.org/10.4155/fmc-2017-0014).

García-Bermejo, Á., Herrero, L., González, M.-J., Gómara, B. Occurrence and Estimated Dietary Intake of PCBs and PCDD/Fs in Functional Foods Enriched with Omega-3 from Spain. (2017) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65 (16), pp. 3396-3405. DOI: [10.1021/acs.jafc.7b00785](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.7b00785).

Ramos, K., Ramos, L., Gómez-Gómez, M.M. Simultaneous

characterisation of silver nanoparticles and determination of dissolved silver in chicken meat subjected to in vitro human gastrointestinal digestion using single particle inductively coupled plasma mass spectrometry. (2017) *Food Chemistry*, 221, pp. 822-828. DOI: [10.1016/j.foodchem.2016.11.091](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.11.091).

Ismaili, L., Romero, A., do Carmo Carreiras, M., Marco-Contelles, J. Multitarget-Directed Antioxidants as Therapeutic Agents: Putting the Focus on the Oxidative Stress. (2017) *Design of Hybrid Molecules for Drug Development*, pp. 5-46. DOI: [10.1016/B978-0-08-101011-2.00002-7](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-101011-2.00002-7).

Varela, I., Faustino, H., Díez, E., Iglesias-Sigüenza, J., Grande-Carmona, F., Fernández, R., Lassaletta, J.M., Mascareñas, J.L., López, F. Gold(I)-Catalyzed Enantioselective [2+2+2] Cycloadditions: An Expedient Entry to Enantioenriched Tetrahydropyran Scaffolds. (2017) *ACS Catalysis*, 7 (4), pp. 2397-2402. DOI: [10.1021/acscatal.6b03651](https://doi.org/10.1021/acscatal.6b03651).

del Prado, A., Pintado-Sierra, M., Juan-y-Seva, M., Navarro, R., Reinecke, H., Rodríguez-Hernández, J., Elvira, C., Fernández-Mayoralas, A., Gallardo, A. Aqueous micro and nanoreactors based on alternating copolymers of phenylmaleimide and vinylpyrrolidone bearing pendant l-proline stabilized with PEG grafted chains. (2017) *Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry*, 55 (7), pp. 1228-1236. DOI: [10.1002/pola.28487](https://doi.org/10.1002/pola.28487).

Punzón, E., García-Alvarado, F., Maroto, M., Fernández-Mendivil, C., Michalska, P., García-Álvarez, I., Arranz-Tagarro, J.A., Buendía, I., López, M.G., León, R., Gandía, L., Fernández-Mayoralas, A., García, A.G. Novel sulfoglycolipid IG20 causes neuroprotection by activating the phase II antioxidant response in rat hippocampal slices. (2017) *Neuropharmacology*, 116, pp. 110-121. DOI: [10.1016/j.neuropharm.2016.12.016](https://doi.org/10.1016/j.neuropharm.2016.12.016).

Ismaili, L., Refouvet, B., Benchekroun, M., Brogi, S., Brindisi,



M., Gemma, S., Campiani, G., Filipic, S., Agbaba, D., Esteban, G., Unzeta, M., Nikolic, K., Butini, S., Marco-Contelles, J. Multitarget compounds bearing tacrine- and donepezil-like structural and functional motifs for the potential treatment of Alzheimer's disease. (2017) *Progress in Neurobiology*, 151, pp. 4-34. DOI: [10.1016/j.pneurobio.2015.12.003](https://doi.org/10.1016/j.pneurobio.2015.12.003).

Álvarez-Pérez, M., Velado, M., García-Puentes, D., Sáez, E., Vicent, C., Fernández De La Pradilla, R., Viso, A., De La Torre, M.C., Sierra, M.A. Sulfur Groups Improve the Performance of Triazole- and Triazolium-Based Interaction Units in Anion Binding. (2017) *Journal of Organic Chemistry*, 82 (6), pp. 3341-3346. DOI: [10.1021/acs.joc.7b00261](https://doi.org/10.1021/acs.joc.7b00261).

Casal, P., González-Gaya, B., Zhang, Y., Reardon, A.J.F., Martin, J.W., Jiménez, B., Dachs, J. Accumulation of Perfluoroalkylated Substances in Oceanic Plankton. (2017) *Environmental Science and Technology*, 51 (5), pp. 2766-2775. DOI: [10.1021/acs.est.6b05821](https://doi.org/10.1021/acs.est.6b05821).

Giner, E.A., Gómez-Gallego, M., Casarrubios, L., De La Torre, M.C., Ramírez de Arellano, C., Sierra, M.A. Effect of a  $\kappa$ 1-Bonded-M-1,2,3-triazole (M = Co, Ru) on the Structure and Reactivity of Group 6 Alkoxy (Fischer) Carbenes. (2017) *Inorganic Chemistry*, 56 (5), pp. 2801-2811. DOI: [10.1021/acs.inorgchem.6b02957](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b02957).

Esteban, G., Van Schoors, J., Sun, P., Van Eeckhaut, A., Marco-Contelles, J., Smolders, I., Unzeta, M. In-vitro and in-vivo evaluation of the modulatory effects of the multitarget compound ASS234 on the monoaminergic system. (2017) *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, 69 (3), pp. 314-324. DOI: [10.1111/jphp.12697](https://doi.org/10.1111/jphp.12697).

Moussou, N., Corzo-Martínez, M., Sanz, M.L., Zaidi, F., Montilla, A., Villamiel, M. Assessment of Maillard reaction evolution, prebiotic carbohydrates, antioxidant activity and  $\alpha$ -amylase inhibition in pulse flours. (2017) *Journal of Food Science and Technology*, 54 (4), pp. 890-900. DOI: [10.1007/s13197-016-2298-5](https://doi.org/10.1007/s13197-016-2298-5).

Ramos, E., Patiño, P., Reiter, R.J., Gil-Martín, E., Marco-Contelles, J., Parada, E., los Rios, C.D., Romero, A., Egea, J. Ischemic brain injury: New insights on the protective role of melatonin. (2017) *Free Radical Biology and Medicine*, 104, pp. 32-53. DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2017.01.005](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2017.01.005).

Alcaide, B., Almendros, P., Busto, E., Lázaro-Milla, C. Photoinduced Gold-Catalyzed Domino C(sp) Arylation/Oxyarylation of TMS-Terminated Alkynols with Arenediazonium Salts. (2017) *Journal of Organic Chemistry*, 82 (4), pp. 2177-2186. DOI: [10.1021/acs.joc.6b03006](https://doi.org/10.1021/acs.joc.6b03006).

Frutos, M., Ortuño, M.A., Lledos, A., Viso, A., Fernández De La Pradilla, R., De La Torre, M.C., Sierra, M.A., Gornitzka, H., Hemmert, C. Desulfinylation of Ag(I) Sulfinyl Mesoionic Carbenes: Preparation of C-Unsubstituted Au(I)-1,2,3-Triazole Carbene Complexes. (2017) *Organic Letters*, 19 (4), pp. 822-825. DOI: [10.1021/acs.orglett.6b03808](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.6b03808).

Ruiz-Aceituno, L., Carrero-Carralero, C., Ruiz-Matute, A.I., Ramos, L., Sanz, M.L., Martínez-Castro, I. Characterization of cyclitol glycosides by gas chromatography coupled to mass spectrometry. (2017) *Journal of Chromatography A*, 1484, pp. 58-64. DOI: [10.1016/j.chroma.2017.01.001](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2017.01.001).

Farina-Gomez, N., Barrabes, S., Gomez-Lopez, J.E., Gonzalez, M., Puerta, A., Navarro-Calderon, D., Albers-Acosta, E., Olivier, C., Diez-Masa, J.C., Peracaula, R., de Frutos, M. Sample preparation of serum to allow capillary electrophoresis analysis of prostate specific antigen isoforms. (2017) *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 134, pp. 220-227. DOI: [10.1016/j.jpba.2016.11.045](https://doi.org/10.1016/j.jpba.2016.11.045).

Barrabés, S., Farina-Gomez, N., Llop, E., Puerta, A., Diez-Masa, J.C., Perry, A., de Llorens, R., de Frutos, M., Peracaula, R. Comparative analysis of prostate-specific antigen by two-dimensional gel electrophoresis and capillary electrophoresis.

(2017) *Electrophoresis*, 38 (3-4), pp. 408-416. DOI: [10.1002/elps.201600432](https://doi.org/10.1002/elps.201600432).

De Leon, A.S., Vargas-Alrredo, N., Gallardo, A., Fernandez-Mayoralas, A., Bastida, A., Munoz-Bonilla, A., Rodríguez-Hernandez, J. Microfluidic reactors based on rechargeable catalytic porous supports: Heterogeneous enzymatic catalysis via reversible hostguest interactions. (2017) *ACS Applied Materials and Interfaces*, 9 (4), pp. 4184-4191. DOI: [10.1021/acsami.6b13554](https://doi.org/10.1021/acsami.6b13554).

Pintado-Sierra, M., García-Álvarez, I., Bribián, A., Medina-Rodríguez, E.M., Lebrón-Aguilar, R., Garrido, L., de Castro, F., Fernández-Mayoralas, A., Quintanilla-López, J.E. A comprehensive profiling of sulfatides in myelin from mouse brain using liquid chromatography coupled to high-resolution accurate tandem mass spectrometry. (2017) *Analytica Chimica Acta*, 951, pp. 89-98. DOI: [10.1016/j.aca.2016.11.054](https://doi.org/10.1016/j.aca.2016.11.054).

Soria, A.C., García-Sarrió, M.J., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Headspace Techniques for Volatile Sampling. (2017) *Comprehensive Analytical Chemistry*, 76, pp. 255-278. DOI: [10.1016/bs.coac.2017.02.001](https://doi.org/10.1016/bs.coac.2017.02.001).

Gómez, A.M., Miranda, S., Cristobal López, J. Ferrier rearrangement: An update on recent developments. (2017) *Carbohydrate Chemistry*, 42, pp. 210-247. DOI: [10.1039/9781782626657-00210](https://doi.org/10.1039/9781782626657-00210).

Destito, P., Couceiro, J.R., Faustino, H., López, F., Mascareñas, J.L. Ruthenium-Catalyzed Azide-Thioalkyne Cycloadditions in Aqueous Media: A Mild, Orthogonal, and Biocompatible Chemical Ligation. (2017) *Angewandte Chemie - International Edition*, 56 (36), pp. 10766-10770. DOI: [10.1002/anie.201705006](https://doi.org/10.1002/anie.201705006).

Fernández, D.F., Gulías, M., Mascareñas, J.L., López, F. Iridium(I)-Catalyzed Intramolecular Hydrocarbonation of Alkenes: Efficient Access to Cyclic Systems Bearing Quaternary Stereocenters. (2017)

*Angewandte Chemie - International Edition*, 56 (32), pp. 9541-9545. DOI: [10.1002/anie.201705105](https://doi.org/10.1002/anie.201705105).

Miranda, S., Lobo, F., Gomez, A.M., Lopez, J.C. Ferrier-Nicholas Cations from C-3-Alkynylglycols: Access to C-3-Branched Allylic Glycosides and Ring-Opening Derivatives. (2017) *European Journal of Organic Chemistry*, 2017 (17), pp. 2501-2511. DOI: [10.1002/ejoc.201700189](https://doi.org/10.1002/ejoc.201700189).

Ramos, L. Matrix Solid Phase Dispersion. (2017) *Comprehensive Analytical Chemistry*, 76, pp. 375-402. DOI: [10.1016/bs.coac.2017.01.005](https://doi.org/10.1016/bs.coac.2017.01.005).

Alarcos, N., Sánchez, F., Douhal, A. Confinement effect on ultrafast events of a salicylideneaniline derivative within mesoporous materials. (2017) *Microporous and Mesoporous Materials*, 248, pp. 54-61. DOI: [10.1016/j.micromeso.2017.04.011](https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2017.04.011).

Oset-Gasque, M.J., Marco-Contelles, J. New tacrines as anti-alzheimer's disease agents. The (benzo)chromeno-pyranotacrines. (2017) *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 17 (31), pp. 3349-3360. DOI: [10.2174/1568026618666180112155928](https://doi.org/10.2174/1568026618666180112155928).

Romero, A., Marco-Contelles, J. Recent developments on multi-target-directed tacrines for alzheimer's disease. I. The pyranotacrines. (2017) *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 17 (31), pp. 3328-3335. DOI: [10.2174/1568026618666180112155639](https://doi.org/10.2174/1568026618666180112155639).

Gutiérrez, M., Navarro, R., Sánchez, F., Douhal, A. Photodynamics of Zr-based MOFs: Effect of explosive nitroaromatics. (2017) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19 (25), pp. 16337-16347. DOI: [10.1039/c7cp02590d](https://doi.org/10.1039/c7cp02590d).

Ladraa, S., Chioua, M., Belfaitah, A. A Simple and Ecofriendly One-Pot Synthesis of Highly Substituted 3-Cyanopyridine-Quinoline Hybrids via a Triphenylphosphine-Catalyzed Multicomponent

Reaction Under Mild Conditions. (2017) *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 54 (1), pp. 603-609. DOI: [10.1002/jhet.2631](https://doi.org/10.1002/jhet.2631).

Navarro, R., Monterde, C., Molina, S., Pérez-Perrino, M., Reviriego, F., Del Prado, A., Gallardo, A., Reinecke, H. Understanding the regioselectivity of Michael addition reactions to asymmetric divinyl compounds. (2017) *RSC Advances*, 7 (89), pp. 56157-56165. DOI: [10.1039/c7ra11005g](https://doi.org/10.1039/c7ra11005g).

Gutiérrez, M., López-González, M., Sánchez, F., Douhal, A. Efficient light harvesting within a C153@Zr-based MOF embedded in a polymeric film: Spectral and dynamical characterization. (2017) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19 (27), pp. 17544-17552. DOI: [10.1039/c7cp02094e](https://doi.org/10.1039/c7cp02094e).

Del Río, M., Lobo, F., Cristobal Lopez, J., Oviden, A., Bañuelos, J., Lopez-Arbeloa, I., Garcia-Moreno, I., Gomez, A.M. One-pot synthesis of rotationally restricted, conjugatable, BODIPY derivatives from phthalides. (2017) *Journal of Organic Chemistry*, 82 (2), pp. 1240-1247. DOI: [10.1021/acs.joc.6b02426](https://doi.org/10.1021/acs.joc.6b02426).

Alcaide, B., Almendros, P., Cembellín, S., Fernández, I., Martínez del Campo, T. Cationic Au III versus Au I : Catalyst-Controlled Divergent Reactivity of Alkyne-Tethered Lactams. (2017) *Chemistry - A European Journal*, 23 (13), pp. 3012-3015. DOI: [10.1002/chem.201700234](https://doi.org/10.1002/chem.201700234).

Pérez Mayoral, E., Soriano, E., Calvino-Casilda, V., Rojas-Cervantes, M.L., Martín-Aranda, R.M. Silica-based nanocatalysts in the C-S and C-heteroatom bond forming cascade reactions for the synthesis of biologically active heterocyclic scaffolds. (2017) *Catalysis Today*, 285, pp. 65-88. DOI: [10.1016/j.cattod.2017.01.048](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2017.01.048).

Valderas, C., Casarrubios, L., de la Torre, M.C., Sierra, M.A. The organocatalytic desymmetrization of meso-ferrocene anhydride. (2017) *Tetrahedron Letters*, 58 (4), pp. 326-328. DOI: [10.1016/j.tetlet.2016.12.025](https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2016.12.025).

Saadeh, H.A., Khasawneh, M.A., Abu-Zeid, Y.A., El-Haty, I.A., Mubarak, M.S., Nsangou, S.P., Goyal, K., Sehgal, R., Marco-Contelles, J., Samadi, A. Novel 5-Nitroimidazole and 5-Nitrothiazole Piperazine Derivatives and Their Antiparasitic Activity. (2017) *ChemistrySelect*, 2 (20), pp. 5684-5687. DOI: [10.1002/slct.201700348](https://doi.org/10.1002/slct.201700348).

Balmori, A., Chioua, M., de la Bellacasa, R.P., Estrada-Tejedor, R., Ismaili, L., Marco-Contelles, J., Borrell, J.I. 5-Amino-6,7,8,9-Tetrahydrobenzo[b][1,8]Naphthyridin-2(1H)-One: The first Example of a new Family of HuperTacrines for Alzheimer's Disease Therapy. (2017) *ChemistrySelect*, 2 (8), pp. 2605-2610. DOI: [10.1002/slct.201700289](https://doi.org/10.1002/slct.201700289).

Godino-Ojer, M., Soriano, E., Calvino-Casilda, V., Maldonado-Hódar, F.J., Pérez-Mayoral, E. Metal-free synthesis of quinolines catalyzed by carbon aerogels: Influence of the porous texture and surface chemistry. (2017) *Chemical Engineering Journal*, 314, pp. 488-497. DOI: [10.1016/j.cej.2016.12.006](https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.12.006).

Sánchez-Moreno, I., Monsalve-Hernando, C., Godino, A., Illa, L., Gaspar, M.J., Muñoz, G.M., Díaz, A., Martín, J.L., García-Junceda, E., Fernández-Mayoralas, A., Hermida, C. Analytical Validation of a New Enzymatic and Automatable Method for d-Xylose Measurement in Human Urine Samples. (2017) *BioMed Research International*, 2017, art. no. 8421418. DOI: [10.1155/2017/8421418](https://doi.org/10.1155/2017/8421418).

Wang, L., Moraleda, I., Iriepa, I., Romero, A., López-Muñoz, F., Chioua, M., Inokuchi, T., Bartolini, M., Marco-Contelles, J. 5-Methyl-N-(8-(5,6,7,8-tetrahydroacridin-9-ylamino)octyl)-5H-indolo[2,3-b]quinolin-11-amine: A highly potent human cholinesterase inhibitor. (2017) *MedChemComm*, 8 (6), pp. 1307-1317. DOI: [10.1039/c7md00143f](https://doi.org/10.1039/c7md00143f).

Sáenz-de-Santa-María, I., Bernardo-Castiñeira, C., Enciso, E., García-Moreno, I., Chiara, J.L., Suarez, C., Chiara, M.-D. Control of long-distance cell-to-cell communication and autophagosome transfer in squamous cell carcinoma via tunneling nanotubes.



(2017) *Oncotarget*, 8 (13), pp. 20939-20960. DOI: [10.18632/oncotarget.15467](https://doi.org/10.18632/oncotarget.15467).

Serrano, M.P., Herrero-Labrador, R., Futch, H.S., Serrano, J., Romero, A., Fernandez, A.P., Samadi, A., Unzeta, M., Marco-Contelles, J., Martínez-Murillo, R. The proof-of-concept of ASS234: Peripherally administered ASS234 enters the central nervous system and reduces pathology in a male mouse model of Alzheimer disease. (2017) *Journal of Psychiatry and Neuroscience*, 42 (1), pp. 59-69. DOI: [10.1503/jpn.150209](https://doi.org/10.1503/jpn.150209).

Dgachi, Y., Sokolov, O., Luzet, V., Godyń, J., Panek, D., Bonet, A., Martin, H., Iriepa, I., Moraleda, I., García-Iriepa, C., Janockova, J., Richert, L., Soukup, O., Malawska, B., Chabchoub, F., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Tetrahydropyranodiquinolin-8-amines as new, non hepatotoxic, antioxidant, and acetylcholinesterase inhibitors for Alzheimer's disease therapy. (2017) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 126, pp. 576-589. DOI: [10.1016/j.ejmech.2016.11.050](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.11.050).

Marín-Ramos, N.I., Piñar, C., Vázquez-Villa, H., Martín-Fontecha, M., González, Á., Canales, Á., Algar, S., Mayo, P.P., Jiménez-Barbero, J., Gajate, C., Mollinedo, F., Pardo, L., Ortega-Gutiérrez, S., Viso, A., López-Rodríguez, M.L. Development of a Nucleotide Exchange Inhibitor That Impairs Ras Oncogenic Signaling. (2017) *Chemistry - A European Journal*, 23 (7), pp. 1676-1685. DOI: [10.1002/chem.201604905](https://doi.org/10.1002/chem.201604905).

Saadeh, H.A., Khasawneh, M.A., Samadi, A., El-Haty, I.A., Satała, G., Bojarski, A.J., Ismaili, L., Bautista-Aguilera, Ó.M., Yañez, M., Mestres, J., Marco-Contelles, J. Design, Synthesis and Biological Evaluation of Potent Antioxidant 1-(2,5-Dimethoxybenzyl)-4-arylpiperazines and N-Azoyl Substituted 2-(4-Arylpiperazin-1-yl). (2017) *ChemistrySelect*, 2 (13), pp. 3854-3859. DOI: [10.1002/slct.201700397](https://doi.org/10.1002/slct.201700397).

Bautista-Aguilera, Ó.M., Hagenow, S., Palomino-Antolin, A., Farré-

Alins, V., Ismaili, L., Joffrin, P.-L., Jimeno, M.L., Soukup, O., Janočková, J., Kalinowsky, L., Proschak, E., Iriepa, I., Moraleda, I., Schwed, J.S., Romero Martínez, A., López-Muñoz, F., Chioua, M., Egea, J., Ramsay, R.R., Marco-Contelles, J., Stark, H. Multitarget-Directed Ligands Combining Cholinesterase and Monoamine Oxidase Inhibition with Histamine H<sub>3</sub> R Antagonism for Neurodegenerative Diseases. (2017) *Angewandte Chemie - International Edition*, 56 (41), pp. 12765-12769. DOI: [10.1002/anie.201706072](https://doi.org/10.1002/anie.201706072).

## 2018

Del Pino, J., Marco-Contelles, J., López-Muñoz, F., Romero, A., Ramos, E. Neuroinflammation Signaling Modulated by ASS234, a Multitarget Small Molecule for Alzheimer's Disease Therapy. (2018) *ACS Chem. Neurosc.*, 9 (12), 2880-2885. DOI: [10.1021/acscchemneuro.8b00203](https://doi.org/10.1021/acscchemneuro.8b00203).

Benito-Arenas, R., Doncel-Pérez, E., Fernández-Gutiérrez, M., Garrido, L., García-Junceda, E., Revuelta, J., Bastida, A., Fernández-Mayoralas, A. A holistic approach to unravelling chondroitin sulfation: Correlations between surface charge, structure and binding to growth factors. (2018) *Carbohydrate Polymers*, 202, 211-218. DOI: [10.1016/j.carbpol.2018.08.120](https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2018.08.120).

Reyes-Resina, I., Samadi, A., Navarro, G., Saadeh, H.A., Khasawneh, M.A., Mestres, J., Marco-Contelles, J., Franco, R. Identification of a Tool Compound to Study the Mechanisms of Functional Selectivity between D<sub>2</sub> and D<sub>3</sub> Dopamine Receptors. (2018) *ACS Omega*, 3 (12), pp. 17368-17375. DOI: [10.1021/acsomega.8b02509](https://doi.org/10.1021/acsomega.8b02509).

Marcote, D.C., Varela, I., Fernández-Casado, J., Mascarenas, J.L., López, F. Gold(I)-Catalyzed Enantioselective Annulations between Allenes and Alkene-Tethered Oxime Ethers: A Straight Entry to Highly Substituted Piperidines and aza-Bridged Medium-Sized Carbocycles. (2018) *Journal of the American Chemical Society*, 140



(48), pp. 16821-16833. DOI: [10.1021/jacs.8b10388](https://doi.org/10.1021/jacs.8b10388).

Vidal, C., Tomás-Gamasa, M., Destito, P., López, F., Mascareñas, J.L. Concurrent and orthogonal gold(I) and ruthenium(II) catalysis inside living cells. (2018) *Nature Communications*, 9 (1), art. no. 1913. DOI: [10.1038/s41467-018-04314-5](https://doi.org/10.1038/s41467-018-04314-5).

Ali, W., Álvarez-Pérez, M., Marć, M.A., Salardón-Jiménez, N., Handzlik, J., Domínguez-Álvarez, E. The Anticancer and Chemopreventive Activity of Selenocyanate-Containing Compounds. (2018) *Current Pharmacology Reports*, 4 (6), pp. 468-481. DOI: [10.1007/s40495-018-0160-3](https://doi.org/10.1007/s40495-018-0160-3).

Carrero-Carralero, C., Mansukhani, D., Ruiz-Matute, A.I., Martínez-Castro, I., Ramos, L., Sanz, M.L. Extraction and characterization of low molecular weight bioactive carbohydrates from mung bean (*Vigna radiata*). (2018) *Food Chemistry*, 266, pp. 146-154. DOI: [10.1016/j.foodchem.2018.05.114](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.05.114).

Almendros, P., Yanai, H., Hoshikawa, S., Aragoncillo, C., Lázaro-Milla, C., Toledano-Pinedo, M., Matsumoto, T., Alcaide, B. Transition metal-free controlled synthesis of bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]ethyl-decorated heterocycles. (2018) *Organic Chemistry Frontiers*, 5 (21), pp. 3163-3169. DOI: [10.1039/c8qo00955d](https://doi.org/10.1039/c8qo00955d).

Casal, P., Cabrerizo, A., Vila-Costa, M., Pizarro, M., Jiménez, B., Dachs, J. Pivotal Role of Snow Deposition and Melting Driving Fluxes of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons at Coastal Livingston Island (Antarctica). (2018) *Environmental Science and Technology*, 52 (21), pp. 12327-12337. DOI: [10.1021/acs.est.8b03640](https://doi.org/10.1021/acs.est.8b03640).

Castano, M., Martínez-Campos, E., Pintado-Sierra, M., García, C., Reinecke, H., Gallardo, A., Rodríguez-Hernández, J., Elvira, C. Combining Breath Figures and Supercritical Fluids to Obtain Porous Polymer Scaffolds. (2018) *ACS Omega*, 3 (10), pp. 12593-12599. DOI: [10.1021/acsomega.8b02024](https://doi.org/10.1021/acsomega.8b02024).

Miranda, S., Gómez, A.M., López, J.C. Diversity-Oriented Synthetic Endeavors of Newly Designed Ferrier and Ferrier-Nicholas Systems Derived from 1-C-Alkynyl-2-deoxy-2-C-Methylene Pyranosides. (2018) *European Journal of Organic Chemistry*, 2018 (39), pp. 5355-5374. DOI: [10.1002/ejoc.201801004](https://doi.org/10.1002/ejoc.201801004).

Carrero-Carralero, C., Rodríguez-Sánchez, S., Calvillo, I., Martínez-Castro, I., Soria, A.C., Ramos, L., Sanz, M.L. Gas chromatographic-based techniques for the characterization of low molecular weight carbohydrates and phenylalkanoic glycosides of *Sedum roseum* root supplements. (2018) *Journal of Chromatography A*, 1570, pp. 116-125. DOI: [10.1016/j.chroma.2018.07.071](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2018.07.071).

Ramos, E., Marco-Contelles, J., López-Muñoz, F., Romero, A. In silico assessment of the metabolism and its safety significance of multitarget propargylamine ASS234. (2018) *CNS Neuroscience and Therapeutics*, 24 (10), pp. 981-983. DOI: [10.1111/cns.12990](https://doi.org/10.1111/cns.12990).

Tinoco, P., Almendros, G., Sanz, J. Soil Perturbation in Mediterranean Ecosystems Reflected by Differences in Free-Lipid Biomarker Assemblages. (2018) *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 66 (38), pp. 9895-9906. DOI: [10.1021/acs.jafc.8b01483](https://doi.org/10.1021/acs.jafc.8b01483).

Ramos, E., Romero, A., Marco-Contelles, J., López-Muñoz, F., Del Pino, J. Modulation of Heat Shock Response Proteins by ASS234, Targeted for Neurodegenerative Diseases Therapy. (2018) *Chemical Research in Toxicology*, 31 (9), pp. 839-842. DOI: [10.1021/acs.chemrestox.8b00192](https://doi.org/10.1021/acs.chemrestox.8b00192).

Marsili, L., Jiménez, B., Borrell, A. Persistent organic pollutants in cetaceans living in a hotspot area: The mediterranean sea. (2018) *Marine Mammal Ecotoxicology: Impacts of Multiple Stressors on Population Health*, pp. 185-212. DOI: [10.1016/B978-0-12-812144-3.00007-3](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812144-3.00007-3).

Roscales, J.L., Muñoz-Arnanz, J., Ros, M., Vicente, A., Barrios, L., Jiménez, B. Assessment of POPs in air from Spain using passive sampling from 2008 to 2015. Part I: Spatial and temporal observations of PBDEs. (2018) *Science of the Total Environment*, 634, pp. 1657-1668. DOI: [10.1016/j.scitotenv.2018.03.043](https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.03.043).

van Drooge, B.L., Fontal, M., Fernández, P., Fernández, M.A., Muñoz-Arnanz, J., Jiménez, B., Grimalt, J.O. Organic molecular tracers in atmospheric PM 1 at urban intensive traffic and background sites in two high-insolation European cities. (2018) *Atmospheric Environment*, 188, pp. 71-81. DOI: [10.1016/j.atmosenv.2018.06.024](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2018.06.024).

Muñoz-Arnanz, J., Roscales, J.L., Vicente, A., Ros, M., Barrios, L., Morales, L., Abad, E., Jiménez, B. Assessment of POPs in air from Spain using passive sampling from 2008 to 2015. Part II: Spatial and temporal observations of PCDD/Fs and dl-PCBs. (2018) *Science of the Total Environment*, 634, pp. 1669-1679. DOI: [10.1016/j.scitotenv.2018.04.164](https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.04.164).

Bautista-Aguilera, O.M., Budni, J., Mina, F., Medeiros, E.B., Deuther-Conrad, W., Entrena, J.M., Moraleda, I., Iriepa, I., López-Muñoz, F., Marco-Contelles, J. Contilisant, a Tetratarget Small Molecule for Alzheimer's Disease Therapy Combining Cholinesterase, Monoamine Oxidase Inhibition, and H3R Antagonism with S1R Agonism Profile. (2018) *Journal of Medicinal Chemistry*, 61 (15), pp. 6937-6943. DOI: [10.1021/acs.jmedchem.8b00848](https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.8b00848).

Bermejo, I.A., Usabiaga, I., Compañón, I., Castro-López, J., Insausti, A., Fernández, J.A., Avenzoza, A., Busto, J.H., Jiménez-Barbero, J., Asensio, J.L., Peregrina, J.M., Jiménez-Osés, G., Hurtado-Guerrero, R., Cocinero, E.J., Corzana, F. Water Sculpts the Distinctive Shapes and Dynamics of the Tumor-Associated Carbohydrate Tn Antigens: Implications for Their Molecular Recognition. (2018) *Journal of the American Chemical Society*, 140 (31), pp. 9952-9960. DOI: [10.1021/jacs.8b04801](https://doi.org/10.1021/jacs.8b04801).

Yanai, H., Almendros, P., Takahashi, S., Lázaro-Milla, C., Alcaide, B., Matsumoto, T. Synthesis and Characterization of Stable Phosphorus Carbabetaines. (2018) *Chemistry - An Asian Journal*, 13 (15), pp. 1956-1961. DOI: [10.1002/asia.201800769](https://doi.org/10.1002/asia.201800769).

Fernández, D.F., Rodrigues, C.A.B., Calvelo, M., Gulías, M., Mascareñas, J.L., López, F. Iridium(I)-Catalyzed Intramolecular Cycloisomerization of Enynes: Scope and Mechanistic Course. (2018) *ACS Catalysis*, 8 (8), pp. 7397-7402. DOI: [10.1021/acscatal.8b02139](https://doi.org/10.1021/acscatal.8b02139).

García-Sarrió, M.J., Sanz, M.L., Sanz, J., González-Coloma, A., Cristina Soria, A. A new method for microwave assisted ethanolic extraction of *Mentha rotundifolia* bioactive terpenoids. (2018) *Electrophoresis*, 39 (15), pp. 1957-1965. DOI: [10.1002/elps.201800115](https://doi.org/10.1002/elps.201800115).

Vélez, J.F., Vazquez-Santos, M.B., Amarilla, J.M., Tartaj, P., Herradón, B., Mann, E., del Río, C., Morales, E.. Asymmetrical imidazolium-trialkylammonium room temperature dicationic ionic liquid electrolytes for Li-ion batteries. (2018) *Electrochimica Acta*, 280, pp. 171-180. DOI: [10.1016/j.electacta.2018.05.103](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.05.103).

Groult, H., García-álvarez, I., Romero-Ramírez, L., Nieto-Sampedro, M., Herranz, F., Fernández-Mayoralas, A., Ruiz-Cabello, J. Micellar iron oxide nanoparticles coated with anti-tumor glycosides. (2018) *Nanomaterials*, 8 (8), art. no. 567. DOI: [10.3390/nano8080567](https://doi.org/10.3390/nano8080567).

Ros, M., Escobar-Arnanz, J., Sanz, M.L., Ramos, L. Evaluation of ionic liquid gas chromatography stationary phases for the separation of polychlorinated biphenyls. (2018) *Journal of Chromatography A*, 1559, pp. 156-163. DOI: [10.1016/j.chroma.2017.12.029](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2017.12.029).

Chioua, M., Buzzi, E., Moraleda, I., Iriepa, I., Maj, M., Wnorowski, A., Giovannini, C., Tramarin, A., Portali, F., Ismaili, L., López-Alvarado, P., Bolognesi, M.L., Józwiak, K., Menéndez, J.C., Marco-Contelles,

J., Bartolini, M. Tacripyrimidines, the first tacrine-dihydropyrimidine hybrids, as multi-target-directed ligands for Alzheimer's disease. (2018) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 155, pp. 839-846. DOI: [10.1016/j.ejmech.2018.06.044](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.06.044).

Verdugo, F., Villarino, L., Durán, J., Gullías, M., Mascareñas, J.L., López, F. Enantioselective Palladium-Catalyzed [3C + 2C] and [4C + 3C] Intramolecular Cycloadditions of Alkylidenecyclopropanes. (2018) *ACS Catalysis*, 8 (7), pp. 6100-6105. DOI: [10.1021/acscatal.8b01296](https://doi.org/10.1021/acscatal.8b01296).

Doncel-Pérez, E., Aranaz, I., Bastida, A., Revuelta, J., Camacho, C., Acosta, N., Garrido, L., Civera, C., García-Junceda, E., Heras, A., Fernández-Mayoralas, A. Synthesis, physicochemical characterization and biological evaluation of chitosan sulfate as heparan sulfate mimics. (2018) *Carbohydrate Polymers*, 191, pp. 225-233. DOI: [10.1016/j.carbpol.2018.03.036](https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2018.03.036).

Gauss, D., Sánchez-Moreno, I., Oroz-Guinea, I., García-Junceda, E., Wohlgemuth, R. Phosphorylation Catalyzed by Dihydroxyacetone Kinase. (2018) *European Journal of Organic Chemistry*, 2018 (23), pp. 2892-2895. DOI: [10.1002/ejoc.201800350](https://doi.org/10.1002/ejoc.201800350).

Aguirre-Díaz, L.M., Snejko, N., Iglesias, M., Sánchez, F., Gutiérrez-Puebla, E., Monge, M.Á. Efficient Rare-Earth-Based Coordination Polymers as Green Photocatalysts for the Synthesis of Imines at Room Temperature. (2018) *Inorganic Chemistry*, 57 (12), pp. 6883-6892. DOI: [10.1021/acs.inorgchem.8b00465](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b00465).

Alcaide, B., Almendros, P., Lázaro-Milla, C., Delgado-Martínez, P. Divergence in Ynone Reactivity: Atypical Cyclization by 3,4-Difunctionalization versus Rare Bis(cyclization). (2018) *Chemistry - A European Journal*, 24 (32), pp. 8186-8194. DOI: [10.1002/chem.201800630](https://doi.org/10.1002/chem.201800630).

Ramos, E., Romero, A., Egea, J., Marco-Contelles, J., Del Pino, J., De Los Riós, C. Analysis of gene expression profiles of CR80,

a neuroprotective 1,8-Naphthyridine. (2018) *Future Medicinal Chemistry*, 10 (11), pp. 1289-1300. DOI: [10.4155/fmc-2018-0004](https://doi.org/10.4155/fmc-2018-0004).

Doncel-Pérez, E., Ellis, G., Sandt, C., Shuttleworth, P.S., Bastida, A., Revuelta, J., García-Junceda, E., Fernández-Mayoralas, A., Garrido, L. Biochemical profiling of rat embryonic stem cells grown on electrospun polyester fibers using synchrotron infrared microspectroscopy. (2018) *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 410 (16), pp. 3649-3660. DOI: [10.1007/s00216-018-1049-z](https://doi.org/10.1007/s00216-018-1049-z).

Alcaide, B., Almendros, P., Aragoncillo, C., Busto, E., López-Calixto, C.G., Liras, M., de la Peña O'Shea, V.A., García-Sánchez, A., Stone, H.V. A Facile Synthesis of Blue Luminescent [7]Helicenocarbazoles Based on Gold-Catalyzed Rearrangement-Iodonium Migration and Suzuki-Miyaura Benzannulation Reactions. (2018) *Chemistry - A European Journal*, 24 (30), pp. 7620-7625. DOI: [10.1002/chem.201801179](https://doi.org/10.1002/chem.201801179).

Bordes, I., García-Junceda, E., Sánchez-Moreno, I., Castillo, R., Moliner, V. Computational study of the phosphoryl donor activity of dihydroxyacetone kinase from ATP to inorganic polyphosphate. (2018) *International Journal of Quantum Chemistry*, 118 (9), art. no. e25520. DOI: [10.1002/qua.25520](https://doi.org/10.1002/qua.25520).

Bastida, A., Blanco, R.M., Zárate, S.G., García-Junceda, E., Guisán, J.M. Highly improved enzymatic peptide synthesis by using biphasic reactors. (2018) *Biocatalysis and Biotransformation*, 36 (3), pp. 271-278. DOI: [10.1080/10242422.2017.1326484](https://doi.org/10.1080/10242422.2017.1326484).

Alcántara, A.R., García-Junceda, E., Gotor, V., Plou, F.J. Biocatalysis in Spain: A field of success and innovation. (2018) *Biocatalysis and Biotransformation*, 36 (3), pp. 180-183. DOI: [10.1080/10242422.2017.1420064](https://doi.org/10.1080/10242422.2017.1420064).

Albrecht, A., Vovk, I., Mavri, J., Marco-Contelles, J., Ramsay, R.R. Evidence for a cyanine link between propargylamine drugs and



monoamine oxidase clarifies the inactivation mechanism. (2018) *Frontiers in Chemistry*, 6 (MAY), art. no. 169. DOI: [10.3389/fchem.2018.00169](https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00169).

Affini, A., Hagenow, S., Zivkovic, A., Marco-Contelles, J., Stark, H. Novel indanone derivatives as MAO B/H3R dual-targeting ligands for treatment of Parkinson's disease. (2018) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 148, pp. 487-497. DOI: [10.1016/j.ejmech.2018.02.015](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.02.015).

Oset-Gasque, M.J., Marco-Contelles, J. Alzheimer's Disease, the "one-Molecule, One-Target" Paradigm, and the Multitarget Directed Ligand Approach. (2018) *ACS Chemical Neuroscience*, 9 (3), pp. 401-403. DOI: [10.1021/acscemneuro.8b00069](https://doi.org/10.1021/acscemneuro.8b00069).

Gutiérrez, M., Martín, C., Kennes, K., Hofkens, J., Van der Auweraer, M., Sánchez, F., Douhal, A. New OLEDs Based on Zirconium Metal-Organic Framework. (2018) *Advanced Optical Materials*, 6 (6), art. no. 1701060. DOI: [10.1002/adom.201701060](https://doi.org/10.1002/adom.201701060).

Blázquez-Moraleja, A., Cerdán, L., García-Moreno, I., Avellanal-Zaballa, E., Bañuelos, J., Jimeno, M.L., López-Arbeloa, I., Chiara, J.L. Stereochemical and Steric Control of Photophysical and Chiroptical Properties in Bichromophoric Systems. (2018) *Chemistry - A European Journal*, 24 (15), pp. 3802-3815. DOI: [10.1002/chem.201705698](https://doi.org/10.1002/chem.201705698).

Ramos, L., Tranchida, P.Q., Schoenmakers, P. FOREWORD. (2018) *Journal of Chromatography A*, 1536, p. 1. DOI: [10.1016/j.chroma.2018.01.018](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2018.01.018).

Escobar-Arnanz, J., Mekni, S., Blanco, G., Eljarrat, E., Barceló, D., Ramos, L. Characterization of organic aromatic compounds in soils affected by an uncontrolled tire landfill fire through the use of comprehensive two-dimensional gas chromatography–time-of-flight mass spectrometry. (2018) *Journal of Chromatography A*, 1536, pp.

163-175. DOI: [10.1016/j.chroma.2017.10.044](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2017.10.044).

García-Roa, R., Sáiz, J., Gómara, B., López, P., Martín, J. How to tackle chemical communication? Relative proportions versus semiquantitative determination of compounds in lizard chemical secretions. (2018) *Ecology and Evolution*, 8 (4), pp. 2032-2040. DOI: [10.1002/ece3.3825](https://doi.org/10.1002/ece3.3825).

Navarro, R., Monterde, C., Iglesias, M., Sánchez, F. Readily Available Highly Active [Ti]-Adamantyl-BINOL Catalysts for the Enantioselective Alkylation of Aldehydes. (2018) *ACS Omega*, 3 (1), pp. 1197-1200. DOI: [10.1021/acsomega.7b02013](https://doi.org/10.1021/acsomega.7b02013).

Alcaide, B., Almendros, P., Fernández, I., Herrera, F., Luna, A. Gold-Catalyzed Divergent Ring-Closing Modes of Indole-Tethered Amino Allenynes. (2018) *Chemistry - A European Journal*, 24 (6), pp. 1448-1454. DOI: [10.1002/chem.201705294](https://doi.org/10.1002/chem.201705294).

Almendros, G., Hernández, Z., Sanz, J., Rodríguez-Sánchez, S., Jiménez-González, M.A., González-Pérez, J.A. Graphical statistical approach to soil organic matter resilience using analytical pyrolysis data. (2018) *Journal of Chromatography A*, 1533, pp. 164-173. DOI: [10.1016/j.chroma.2017.12.015](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2017.12.015).

Zárate, S.G., De La Cruz Claire, M.L., Benito-Arenas, R., Revuelta, J., Santana, A.G., Bastida, A. Overcoming aminoglycoside enzymatic resistance: Design of novel antibiotics and inhibitors. (2018) *Molecules*, 23 (2), art. no. 284. DOI: [10.3390/molecules23020284](https://doi.org/10.3390/molecules23020284).

Alcaide, B., Almendros, P., Martínez Del Campo, T., Naranjo, T. Gold-catalyzed preparation of annelated 2-azetidiones: Via divergent heterocyclization of enyne-tethered oxazolidines. (2018) *Organic Chemistry Frontiers*, 5 (5), pp. 817-821. DOI: [10.1039/c7qo00950j](https://doi.org/10.1039/c7qo00950j).

Marć, M.A., Domínguez-Álvarez, E., Słoczyńska, K., Żmudzki, P., Chłoń-Rzepa, G., Pękala, E. In Vitro Biotransformation, Safety,



and Chemopreventive Action of Novel 8-Methoxy-Purine-2,6-Dione Derivatives. (2018) *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 184 (1), pp. 124-139. DOI: [10.1007/s12010-017-2527-z](https://doi.org/10.1007/s12010-017-2527-z).

Gomez, E., Alarcos, N., Monterde, C., Sánchez, F., Moreno, M., Douhal, A. Experimental and theoretical insights into the influence of electronic density on proton-transfer reactions. (2018) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20 (42), pp. 27149-27161. DOI: [10.1039/c8cp03185a](https://doi.org/10.1039/c8cp03185a).

Álvarez-Pérez, M., Ali, W., Marć, M.A., Handzlik, J., Domínguez-Álvarez, E. Selenides and diselenides: A review of their anticancer and chemopreventive activity. (2018) *Molecules*, 23 (3), art. no. 628. DOI: [10.3390/molecules23030628](https://doi.org/10.3390/molecules23030628).

Revuelta, J., Fuentes, R., Lagartera, L., Hernáiz, M.J., Bastida, A., García-Junceda, E., Fernández-Mayoralas, A. Assembly of glycoamino acid building blocks: A new strategy for the straightforward synthesis of heparan sulfate mimics. (2018) *Chemical Communications*, 54 (95), pp. 13455-13458. DOI: [10.1039/c8cc08067d](https://doi.org/10.1039/c8cc08067d).

Chioua, M., Serrano, E., Dgachi, Y., Martin, H., Jun, D., Janockova, J., Sepsova, V., Soukup, O., Moraleda, I., Chabchoub, F., Ismaili, L., Iriepa, I., Marco-Contelles, J. Synthesis, Biological Assessment and Molecular Modeling of Racemic QuinoPyranoTacrines for Alzheimer's Disease Therapy. (2018) *ChemistrySelect*, 3 (2), pp. 461-466. DOI: [10.1002/slct.201702781](https://doi.org/10.1002/slct.201702781).

Gajdács, M., Handzlik, J., Sanmartín, C., Domínguez-Álvarez, E., Spengler G. Prediction of ADME properties for selenocompounds with anticancer and efflux pump inhibitory activity using preliminary computational method. (2018) *Acta Pharmaceutica Hungarica*, 88(2), pp. 67-74. Article in Hungarian.

Gajdács, M., Handzlik, J., Sanmartín, C., Domínguez-Álvarez, E., Spengler G. Organoselenium compounds as antitumor agents: in vitro evaluation on a colon cancer model system. (2018) *Acta Pharmaceutica Hungarica*, 88(2), pp. 59-66.